

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

THÈSE PRÉSENTÉE À  
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES

COMME EXIGENCE PARTIELLE  
DU DOCTORAT EN BIOPHYSIQUE

PAR  
JEAN-PIERRE DROLET

MÉTHODES POLYNOMIALES D'INVERSION  
DE DONNÉES ELLIPSOMÉTRIQUES

JANVIER 1996

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

## RÉSUMÉ

Il est montré que plusieurs problèmes d'inversion de données ellipsométriques, habituellement résolus par des méthodes numériques itératives, peuvent s'exprimer sous une forme polynomiale. Les procédures pour calculer les coefficients des polynômes sont développées pour les cas suivants : (a) résoudre l'indice de réfraction et l'épaisseur d'une couche transparente unique sur un substrat par un polynôme du cinquième degré au Chapitre 1; (b) résoudre l'indice de réfraction et l'épaisseur d'une couche transparente dans un système de multicouches par un polynôme du septième degré au Chapitre 2; (c) résoudre l'épaisseur de deux couches transparentes dans un système de multicouches par un polynôme du huitième degré au Chapitre 3.

Quant au Chapitre 4, il est dédié à l'analyse des données ellipsométriques de couches minces à l'interface air-eau. Différents modèles sont évalués pour interpréter la mesure et solutionner les paramètres de la couche mince avec analyse des différentes sources d'erreur.

Les coefficients des polynômes dépendent des autres paramètres connus du système, soit de la mesure ellipsométrique  $\rho$ , de l'angle d'incidence et de la longueur d'onde de la mesure, des indices de réfraction et des épaisseurs des phases connues du système.

Le comportement numérique de chaque méthode polynomiale est analysé et comparé avec celui d'autres méthodes numériques, lorsqu'il en existe, s'appliquant au même problème.

Le travail analytique effectué pour développer les polynômes simplifie beaucoup l'aspect numérique de la solution. En effet, le comportement analytique d'un polynôme est entièrement défini et les méthodes pour en trouver les racines sont rapides, précises et efficaces. Par rapport à d'autres méthodes numériques, la solution des racines d'un polynôme possède l'avantage de calculer en une seule fois *toutes* les solutions physiquement possibles à une mesure. Cela s'effectue sans avoir à donner de valeurs initiales ou de spécifier des intervalles pour la recherche de la solution.

## AVANT-PROPOS

La méthode polynomiale proposée dans le Chapitre 1 et l'Appendice A, ainsi que celle proposée dans le Chapitre 3 et l'Appendice C ont fait l'objet de deux publications distinctes dans *The Journal of the Optical Society of America A*.

Je me dois de remercier mon directeur de thèse, Roger Leblanc, qui m'a d'abord incité à entreprendre des études de troisième cycle, et qui a démontré ensuite une grande patience devant les nombreuses difficultés rencontrées durant le programme de recherche.

Merci à Daniel Ducharme pour sa précieuse collaboration ainsi que pour son implication constante au projet d'ellipsométrie au Centre de recherche en photobiophysique.

Je remercie spécialement Stoyan Roussev qui, par son expérience et sa compétence en ellipsométrie, a donné un apport nouveau à ma recherche doctorale.

## *TABLE DES MATIÈRES*

RÉSUMÉ .....	ii
AVANT-PROPOS.....	iv
TABLE DES MATIÈRES .....	v
LISTE DES APPENDICES .....	viii
LISTE DES TABLEAUX .....	ix
LISTE DES FIGURES .....	x
ABRÉVIATIONS .....	xiv
DÉDICACE .....	xv
 INTRODUCTION .....	 1
La mesure ellipsométrique .....	1
Le modèle des multicouches .....	5
Énoncé du problème .....	8
But du travail .....	10
 CHAPITRES	
1.    SOLUTION POLYNOMIALE POUR L'ÉPAISSEUR ET L'INDICE DE RÉFRACTION D'UNE COUCHE TRANSPARENTE UNIQUE .....	 12
L'équation ellipsométrique .....	12
Méthodes numériques de résolution.....	13
Solutions analytiques .....	17
Obtention de l'équation indépendante de l'épaisseur .....	18
La méthode polynomiale .....	19
Cas particuliers .....	22

Tests numériques .....	26
Analyse de propagation d'erreur .....	28
2. SOLUTION POLYNOMIALE POUR L'ÉPAISSEUR ET L'INDICE DE RÉFRACTION D'UNE COUCHE TRANSPARENTE DANS UN SYSTÈME DE MULTICOUCHES .....	33
Modification de la méthode matricielle .....	33
Développement du polynôme.....	37
Cas particulier où la première couche est inconnue .....	40
Comportement des racines .....	41
Analyse de propagation d'erreur .....	44
3. SOLUTION POLYNOMIALE POUR L'ÉPAISSEUR DE DEUX COUCHES TRANSPARENTES DANS UN SYSTÈME DE MULTICOUCHES .....	48
Dérivation du polynôme .....	48
Cas particulier : les couches minces .....	54
Tests numériques et propagation d'erreur .....	56
4. COUCHES MONOMOLÉCULAIRES À L'INTERFACE AIR-EAU.....	63
Équation au premier ordre .....	65
Solution avec un substrat dispersif.....	67
Mesure près de l'angle de Brewster.....	68
Exemple numérique .....	69
Erreurs de modèle .....	71
Modèle de couche dispersive .....	75
Conclusion.....	80

DISCUSSION .....	82
APPENDICES .....	85
BIBLIOGRAPHIE .....	132



## *LISTE DES APPENDICES*

### Appendices

A.	DÉVELOPPEMENT DU POLYNÔME DU CINQUIÈME DEGRÉ POUR UNE COUCHE TRANSPARENTE UNIQUE .....	85
B.	DÉVELOPPEMENT DU POLYNÔME DU SEPTIÈME DEGRÉ POUR UNE COUCHE TRANSPARENTE DANS UN SYSTÈME DE MULTICOUCHES .....	95
C.	DÉVELOPPEMENT DU POLYNÔME DU HUITIÈME DEGRÉ POUR L'ÉPAISSEUR DE DEUX COUCHES TRANSPARENTES DANS UN SYSTÈME DE MULTICOUCHES .....	100
D.	LES PROGRAMMES.....	106

## *LISTE DES TABLEAUX*

### Tableaux

1. Résultats comparatifs pour différentes méthodes d'inversion : Solution pour l'oxyde de silicium sur substrat de silicium. Selon une mesure de  $\Psi = 14,27^\circ$ , une mesure de  $\Delta = 137,45^\circ$ , un angle d'incidence de  $70,0^\circ$ , une longueur d'onde de 546,1 nm, un indice ambiant de 1,00 et un indice de substrat de  $4,08 - 0,028i$ .....27
2. Les cinq solutions polynomiales pour la même mesure .....28
3. Solutions du polynôme pour les épaisseurs d'un système à deux couches:  $n_3 = 3,88 - 0,018i$ ;  $n_2 = 1,46$ ;  $d_2 = 104$  nm;  $n_1 = 2,00$ ;  $d_1 = 122$  nm;  $\lambda = 632,8$  nm;  $\Psi = 19,05^\circ$ ;  $\Delta = 146,57^\circ$ . Les deux premières colonnes sont les solutions lorsque la première couche est supposée inconnue. Les deux dernières sont les solutions lorsque la seconde couche est supposée inconnue.....42

## *LISTE DES FIGURES*

### Figures

1. Tracé des différents faisceaux lors de la réflexion de la lumière par une interface. ....2
2. Schéma d'un ellipsomètre à intensité nulle en configuration PCSA .....3
3. Le modèle des multicouches. Le milieu incident (indice 0) et le substrat (indice  $k+1$ ) sont séparés par  $k$  couches ayant chacune son épaisseur  $d_j$  et son indice de réfraction complexe  $n_j$ . L'angle de réfraction dans la couche  $j$  est  $\varphi_j$ . ....6
4. Exemple des deux cercles formés par l'équation ellipsométrique. ....16
5. Domaine de solutions lorsqu'une erreur de  $\pm 0,05^\circ$  est incluse à la mesure de  $\Psi$  et  $\Delta$  pour le système oxyde de silicium-silicium .....29
6. Etalement des indices de réfraction produit par les solutions du polynôme lorsque des erreurs aléatoires sont introduites dans les données ellipsométriques simulées. Les erreurs sont distribuées uniformément entre  $\pm 0,1^\circ$  en  $\Psi$  et  $\pm 0,2^\circ$  en  $\Delta$  .....30
7. Etalement des épaisseurs relié aux indices de réfraction de la Figure 6. ....31

8.	Variation des indices solutions de la deuxième couche en fonction de l'angle d'incidence. La solution $n_2 = 1,46$ correspondant au système simulé est stable tandis que l'autre varie. Cette variation permet de discriminer la solution vraie avec une mesure ellipsométrique à deux angles d'incidence. ....	43
9.	Les épaisseurs $d_2$ correspondant aux indices de la Figure 8.....	44
10.	Etalement des indices de réfraction produit par les solutions du polynôme lorsque des erreurs aléatoires sont introduites dans les données ellipsométriques simulées. Les erreurs sont distribuées uniformément entre $\pm 0,1^\circ$ en $\Psi$ et $\pm 0,2^\circ$ en $\Delta$ .....	46
11.	Etalement des épaisseurs relié aux indices de réfraction de la Figure 10. ....	47
12.	Domaine des valeurs de $\Psi$ et $\Delta$ qui possèdent deux solutions (épaisseurs $d_1$ et $d_2$ ) pour une mesure ellipsométrique sur un substrat de silicium ( $n_3 = 3,88-0,018i$ ) couvert d'oxyde de silicium ( $n_2 = 1,46$ ) et de nitrure de silicium ( $n_1 = 2,00$ ). Le milieu ambiant est l'air ( $n_0 = 1$ ), L'angle d'incidence est de $70^\circ$ et la longueur d'onde de 632,8 nm. ....	58
13.	Variation des épaisseurs solutions de la première couche en fonction de l'angle d'incidence. La solution $d_1 = 122$ nm correspondant au système simulé est stable tandis que l'autre varie. Cette variation permet de discriminer la solution vraie avec une mesure ellipsométrique à deux angles d'incidence. ....	59

14. Variation des épaisseurs solutions de la deuxième couche correspondant à la Figure 13. ....	60
15. Etalement des épaisseurs $d_1$ produit par les solutions du polynôme lorsque des erreurs aléatoires sont introduites dans les données ellipsométriques simulées. Les erreurs sont distribuées uniformément entre $\pm 0,1^\circ$ en $\Psi$ et $\pm 0,2^\circ$ en $\Delta$ . ....	61
16. Etalement des épaisseurs $d_2$ produit par les solutions du polynôme lorsque des erreurs aléatoires sont introduites dans les données ellipsométriques simulées. Les erreurs sont distribuées uniformément entre $\pm 0,1^\circ$ en $\Psi$ et $\pm 0,2^\circ$ en $\Delta$ . ....	62
17. Variation en millièmes de degré de la mesure de $\Psi$ sur une monocouche à l'interface air-eau, en fonction de son indice et de son épaisseur. ....	64
18. Variation en millièmes de degré de la mesure de $\Delta$ sur une monocouche à l'interface air-eau, en fonction de son indice et de son épaisseur. ....	65
19. Les mesures de $\Delta$ à deux longueurs d'onde permettent de tracer deux courbes (équations) dont l'intersection est la solution du système. ....	71
20. Solution des mesures de $\Delta$ dans le modèle non dispersif alors que la couche réelle (simulée) est dispersive. ....	73
21. Solution des mesures de $\Delta$ dans le modèle isotrope alors que la couche réelle (simulée) est uniaxiale. ....	74

22. L'intersection des deux courbes (Eqs. (4.22-23)) donne la solution du système simulé. Les courbes sont confondues à toute fin pratique. La croix est située à la véritable solution. ....79

*ABRÉVIATIONS*

<i>n</i> -nôme	polynôme du <i>n</i> ième degré
Eq.	équation

*à Lyse,  
Rachel,  
Joël,  
et Félix*



## *INTRODUCTION*

En ellipsométrie, comme dans toute autre science expérimentale, la démarche scientifique peut se diviser en deux étapes. La première étape consiste à acquérir les données, c'est-à-dire effectuer des mesures ellipsométriques sur le système physique à étudier. Cela comprend la calibration de l'ellipsomètre, la préparation de l'échantillon et la mesure. La seconde étape, principal sujet du présent ouvrage, consiste à interpréter les données obtenues pour leur attribuer un sens physique compréhensible.

L'interprétation des données passe par la conception d'un modèle du système physique étudié. Ce modèle doit refléter le système réel en employant certaines approximations et idéalizations. L'interprétation des données consiste à déterminer quelles valeurs attribuer aux divers paramètres du modèle pour que celui-ci puisse refléter la mesure obtenue.

**La mesure ellipsométrique.**<sup>1</sup> Lorsqu'un faisceau de lumière est orienté sur une interface (Figure 1), celle-ci réfléchit une partie du faisceau avec des changements d'intensité et de phase caractéristiques de l'interface. Ces changements sont différents selon que la polarisation de la lumière est parallèle ou perpendiculaire au plan d'incidence. Un ellipsomètre mesure le changement relatif d'intensité et de phase entre ces deux polarisations du champ électrique de la lumière.

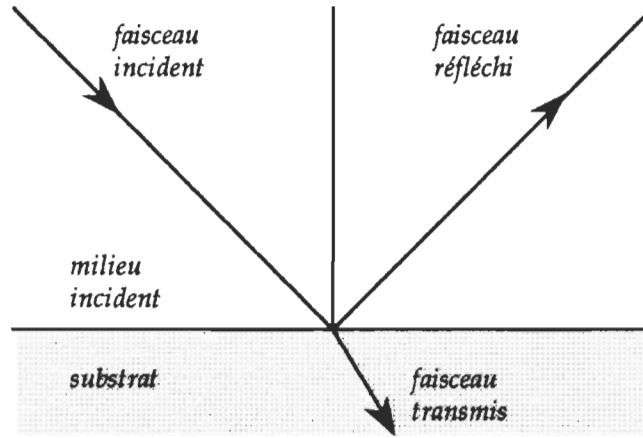


Figure 1. Tracé des différents faisceaux lors de la réflexion de la lumière par une interface.

La lumière incidente est définie par le vecteur  $E_i$  de ses deux composantes de polarisation  $E_i = (E_{si}, E_{pi})$  où l'indice  $s$  indique une polarisation perpendiculaire au plan d'incidence et l'indice  $p$  indique une polarisation parallèle. Chaque composante de polarisation est un nombre complexe ayant une amplitude  $E$  et une phase  $\Delta$  :  $E_{si} = E_{si} \exp(i \Delta_{si})$  et  $E_{pi} = E_{pi} \exp(i \Delta_{pi})$ . Il en est de même pour le faisceau réfléchi  $E_r = (E_{sr}, E_{pr})$  et de ses deux composantes complexes de polarisation. Les coefficients de réflexion  $R_p$  et  $R_s$  sont définis par les rapports d'amplitude (complexes) entre le faisceau incident et le faisceau réfléchi, selon les deux polarisations :  $R_p = E_{pr} / E_{pi}$ ,  $R_s = E_{sr} / E_{si}$ . Le changement relatif d'intensité et de phase entre les deux polarisations du champ électrique de la lumière est définie par le quotient :  $\rho = R_p / R_s$ . Par définition, le rapport ellipsométrique complexe  $\rho$  est caractérisé par deux angles réels, soit  $\Psi$  et  $\Delta$ , par la relation

$$\rho = \tan(\Psi) \exp(i \Delta), \quad (I.1)$$

où  $\tan(\Psi) = |\rho|$  et  $\exp(i\Delta) = \rho/|\rho|$ . Ces deux angles sont reliés directement aux quantités physiques mesurées par l'ellipsomètre.

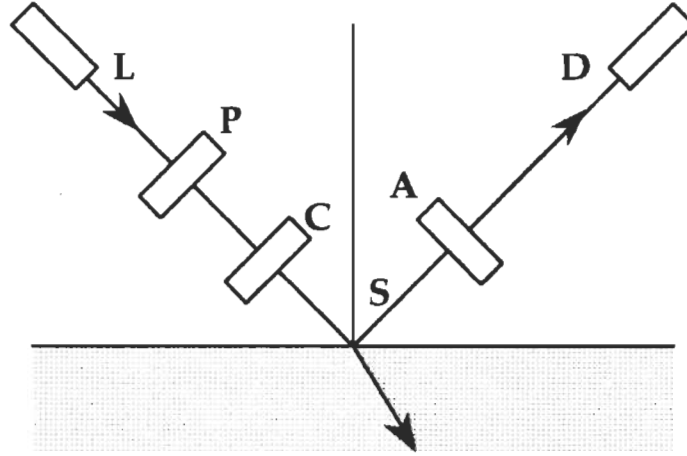


Figure 2. Schéma d'un ellipsomètre à intensité nulle en configuration PCSA.

Le principe d'un ellipsomètre à intensité nulle est illustré à la Figure 2. Dans la configuration PCSA (Polariseur-Compensateur-Système-Analyseur), la lumière issue de la source L est d'abord polarisée par le polariseur P. Elle est ensuite rendue elliptique par le passage à travers le compensateur C, habituellement constitué d'une lame quart-d'onde dont l'axe principal est orienté à  $45^\circ$  par rapport au plan d'incidence. La lumière est réfléchiée par la surface S puis analysée par le polariseur A appelé analyseur. Les azimuts du polariseur et de l'analyseur sont variables et la mesure consiste à trouver les positions du polariseur et de l'analyseur qui annuleront l'intensité lumineuse lue par le détecteur D. On peut démontrer<sup>2</sup> que l'intensité de lumière au détecteur est proportionnelle à  $|L|^2$ , où

$$L = R_p \cos(A) [\cos(P - C) \cos(C) - \rho_C \sin(P - C) \sin(C)] \\ + R_s \sin(A) [\cos(P - C) \sin(C) + \rho_C \cos(C) \sin(P - C)] . \quad (I.2)$$

Les angles  $C$ ,  $P$  et  $A$  représentent les azimuts du compensateur, du polariseur et de l'analyseur respectivement, tandis que  $\rho_C$  est le coefficient complexe de transmission du compensateur. Les valeurs des angles  $P$  et  $A$  à l'extinction du signal lumineux doivent satisfaire  $L = 0$ , c'est-à-dire, en transformant l'Eq. (I.1),

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = -\tan(A) \frac{\rho_C \tan(-C + P) + \tan(C)}{1 - \rho_C \tan(-C + P) \tan(C)}, \quad (\text{I.3})$$

ce qui permet de calculer les angles ellipsométriques de la surface en utilisant l'Eq. (I.1). Lorsque le compensateur consiste en une lame quart-d'onde ( $\rho_C = -i$ ) orientée à  $C = 45^\circ$  du plan d'incidence, l'Eq. (I.3) devient :

$$\rho = -\tan(A) \frac{1 - i \tan\left(P - \frac{1}{4}\pi\right)}{1 + i \tan\left(P - \frac{1}{4}\pi\right)},$$

ou encore, en utilisant une identité trigonométrique,

$$\tan(\Psi) \exp(i \Delta) = -\tan(A) \exp\left[-2i \left[P - \frac{1}{4}\pi\right]\right]. \quad (\text{I.4})$$

Avec la mesure de  $A$  et  $P$  à l'extinction, on calcule les angles  $\Psi$  et  $\Delta$  de la surface en identifiant :

$$\begin{aligned} \tan(\Psi) &= \tan(A) & \Delta &= -2P - 90^\circ & \text{si } \tan(A) > 0, \\ \text{ou } \tan(\Psi) &= -\tan(A) & \Delta &= -2P + 90^\circ & \text{si } \tan(A) < 0. \end{aligned}$$

Une mesure unique des deux angles ellipsométriques permet d'obtenir l'information nécessaire pour déterminer deux paramètres quelconques (épaisseurs ou indices de réfraction) d'un modèle donné de la surface sous observation. Le

modèle de l'interface définissant ces divers paramètres et servant à interpréter les données ellipsométriques est le modèle des multicouches.

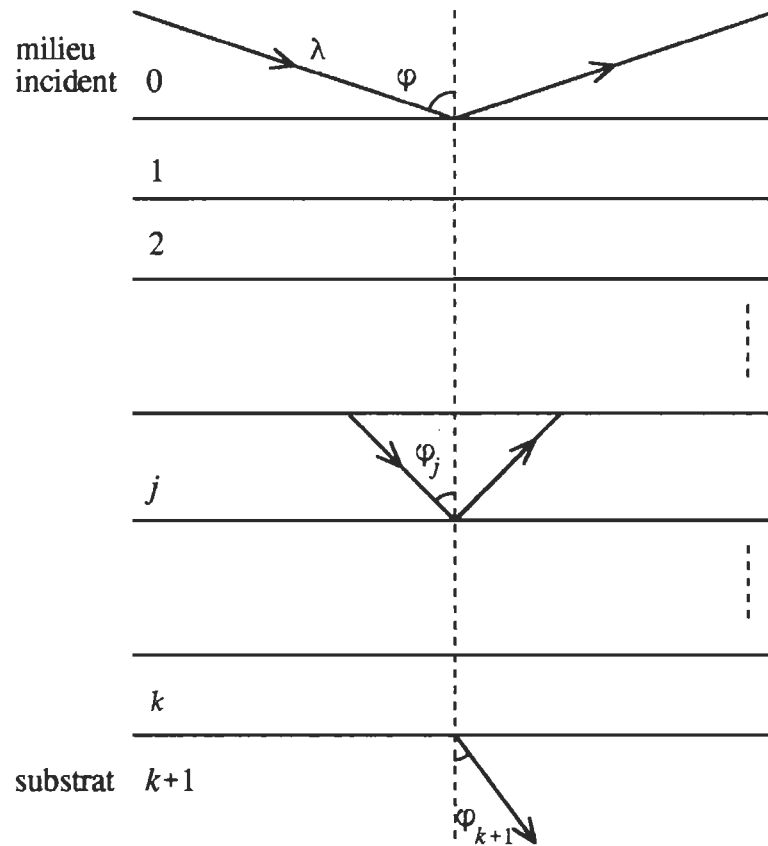
**Le modèle des multicouches.** La façon la plus simple de modéliser optiquement l'interface entre deux milieux est de supposer une transition discontinue entre deux phases d'indices de réfraction différents. Cependant, la réalité physique est plus complexe. Par exemple, la surface d'un solide peut être couverte d'un oxyde dont l'indice est différent du substrat ou encore, comme à l'interface air-liquide, il existe une couche de transition avec gradient d'indices entre les deux phases. Certains systèmes couramment rencontrés, comme par exemple les couches monomoléculaires sur solide ou sur liquide et les couches anti-réfléchissantes, comportent plusieurs phases dont un modèle doit explicitement tenir compte.

On utilise donc le modèle des multicouches. L'interface physique de la Figure 1 est modélisée par plusieurs couches planes, isotropes, homogènes et parallèles disposées entre le milieu incident et le substrat (Figure 3). Chacune des couches est caractérisée par son épaisseur  $d_j$  et son indice de réfraction complexe  $n_j$ . Deux autres paramètres, l'angle d'incidence  $\varphi$  et la longueur d'onde  $\lambda$ , dépendent des conditions expérimentales.

Le calcul du rapport ellipsométrique  $\rho$  d'un système de multicouches s'effectue par la méthode matricielle<sup>3,4</sup>. Cette méthode consiste à calculer une matrice  $S$  pour chaque composante de polarisation, respectivement  $S_s$  et  $S_p$ , définie par

$$S = I_{01} B_1 I_{12} B_2 \dots I_{k,k+1} \quad (I.5)$$

et de façon générale



*Figure. 3.* Le modèle des multicouches. Le milieu incident (indice 0) et le substrat (indice  $k+1$ ) sont séparés par  $k$  couches ayant chacune son épaisseur  $d_j$  et son indice de réfraction complexe  $n_j$ . L'angle de réfraction dans la couche  $j$  est  $\varphi_j$ .

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}.$$

La matrice  $I_{ij}$  caractérise l'interface  $ij$  et la matrice  $B_j$  caractérise la  $j$ ème couche :

$$I_{j,j+1} = \frac{1}{t_{j,j+1}} \begin{pmatrix} 1 & r_{j,j+1} \\ r_{j,j+1} & 1 \end{pmatrix}, \quad (I.6)$$

$$B_j = \begin{pmatrix} \exp[i\beta_j] & 0 \\ 0 & \exp[-i\beta_j] \end{pmatrix}, \quad (I.7)$$

$$\beta_j = 2\pi d_j n_j \cos(\varphi_j) / \lambda. \quad (I.8)$$

Les facteurs  $r_{ij}$  et  $t_{ij}$  sont les coefficients de Fresnel de réflexion et de transmission pour la  $ij$ ème interface. Pour chaque composante de polarisation ( $s$  et  $p$ ) on définit :

$$r_{ijp} = \frac{n_j \cos(\varphi_i) - n_i \cos(\varphi_j)}{n_j \cos(\varphi_i) + n_i \cos(\varphi_j)}, \quad (I.9)$$

$$r_{ijs} = \frac{n_i \cos(\varphi_i) - n_j \cos(\varphi_j)}{n_i \cos(\varphi_i) + n_j \cos(\varphi_j)}, \quad (I.10)$$

$$t_{ijp} = \frac{2n_i \cos(\varphi_i)}{n_j \cos(\varphi_i) + n_i \cos(\varphi_j)}, \quad (I.11)$$

$$t_{ijs} = \frac{2n_i \cos(\varphi_i)}{n_i \cos(\varphi_i) + n_j \cos(\varphi_j)}, \quad (I.12)$$

$$\cos(\varphi_j) = \frac{\sqrt{n_j^2 - n_0^2 (\sin[\varphi_0])^2}}{n_j}. \quad (\text{I.13})$$

L'angle  $\varphi_j$  est l'angle de réfraction dans la  $j$ ème couche (pour le milieu incident,  $\varphi_0 = \varphi$ ). Alors que les coefficients de Fresnel  $r_{ijs}$  et  $r_{ijp}$  caractérisent chaque interface entre les couches, les coefficients de réflexion  $R_p$  et  $R_s$  caractérisent le système global. Ils sont définis par :

$$R_p = \frac{(S_p)_{21}}{(S_p)_{11}}, \quad R_s = \frac{(S_s)_{21}}{(S_s)_{11}}. \quad (\text{I.14})$$

Nous avons par conséquent :

$$\rho = \frac{(S_p)_{21}(S_s)_{11}}{(S_p)_{11}(S_s)_{21}}. \quad (\text{I.15})$$

**Énoncé du problème.** Lorsque tous les paramètres du modèle sont connus, le calcul de  $\rho$  avec la méthode matricielle est appelé le problème direct. Le problème inverse, celui que l'on rencontre expérimentalement, consiste à déterminer les paramètres du modèle (épaisseurs ou indices de réfraction) d'après la mesure de  $\rho$ . Alors que le problème direct est analytique, c'est-à-dire que  $\rho$  est exprimé sous une forme mathématique explicite, le problème inverse ne l'est généralement pas. Pour résoudre les paramètres inconnus, on doit alors utiliser des méthodes numériques itératives de solution d'équations transcendantes. La méthode matricielle se prête bien à la solution de problèmes d'inversion car, comme on peut le voir à l'Eq. (I.5), toute l'information concernant une couche donnée  $j$  est contenue dans le produit de trois matrices consécutives  $I_{j-1,j} B_j I_{j,j+1}$ .



Une seule mesure de  $\rho$  ( $\Psi$  et  $\Delta$ ) permet en principe de déterminer deux paramètres inconnus du modèle. Il y a peu de cas où la solution est analytique, ceux-ci étant :

- a) solution pour l'indice complexe d'une phase d'un système à deux phases (incident-substrat)<sup>5</sup>;
- b) solution pour l'épaisseur de la couche d'un système incident-couche-substrat. L'inversion est incomplète car un seul paramètre est déterminé par la mesure<sup>6</sup>;
- c) solution pour l'épaisseur d'une couche d'un système de multicouches<sup>7</sup>. Il s'agit d'une généralisation du cas précédent et l'inversion est aussi incomplète;
- d) solution pour l'indice complexe du substrat dans un système de multicouches<sup>8</sup>;
- e) solution pour l'épaisseur et l'indice réel d'une couche entre deux phases identiques d'indice réel<sup>9</sup>.

Dans tous les cas énumérés, tous les autres paramètres du système sont définis, et l'inversion est basée sur une seule mesure de  $\Psi$  et  $\Delta$ . Cela exclut par le fait même les cas possibles d'inversion analytique lorsque, en plus de l'ellipsométrie de réflexion, de l'information est aussi obtenue par ellipsométrie de transmission<sup>10-14</sup>. Aussi Dagman<sup>15</sup> a développé une méthode d'inversion analytique pour l'épaisseur et l'indice complexe d'une couche absorbante avec quatre mesures (deux angles d'incidence dans deux milieux incidents différents).

Lorsque le système n'a pas de solution analytique, des méthodes numériques ont été développées pour résoudre itérativement des équations transcendantes<sup>16-23</sup>. L'utilisation de méthodes numériques présente toutefois quelques difficultés. Premièrement, la convergence peut être lente si jamais elle est atteinte. Cela dépend fortement des valeurs initiales données aux paramètres inconnus. Deuxièmement, il y a habituellement plus d'une solution mathématique ou physique pour une mesure particulière effectuée sur le système, c'est-à-dire que plusieurs systèmes distincts peuvent produire la même mesure de  $\Psi$  et  $\Delta$ . On doit connaître toutes les solutions physiquement acceptables pour pouvoir déterminer, par exemple avec une deuxième mesure à un autre angle d'incidence, la solution qui correspond au système étudié. En utilisant des procédures numériques, il est difficile de s'assurer de trouver toutes les solutions à un problème donné, ou même de savoir à l'avance combien de solutions chercher, car le nombre de solutions peut varier d'un système à l'autre.

**But du travail.** Pour circonvenir ces problèmes, les équations ellipsométriques seront reformulées de façon à obtenir une forme mathématique beaucoup plus simple, soit un polynôme. En effet, dans les prochains chapitres il sera démontré que dans quelques cas le problème d'inversion peut se résoudre par l'extraction des racines de polynômes à coefficients réels. Une telle méthode polynomiale, à défaut d'être tout-à-fait analytique, possède l'avantage sur d'autres méthodes numériques de calculer en une seule fois *toutes* les solutions physiquement ou mathématiquement possibles à une mesure, sans avoir à donner des valeurs initiales ou à spécifier des intervalles de recherche de la solution. La seule étape non analytique de la méthode consiste à extraire les racines d'un polynôme, une

procédure numérique pour laquelle il existe des algorithmes rapides, précis et efficaces. Les cas suivants seront développés :

- a) solution pour l'indice réel et l'épaisseur de la couche d'un système à une seule couche (5-nôme);
- b) solution pour l'indice réel et l'épaisseur d'une couche d'un système de multicouches (7-nôme);
- c) solution pour l'épaisseur de deux couches quelconques à indices réels dans un système de multicouches (8-nôme).

Une telle reformulation des équations ellipsométriques requiert un nombre considérable de manipulations algébriques et n'aurait pas été possible sans l'utilisation d'un logiciel d'algèbre symbolique. J'ai utilisé *Theorist*, de Prescience Corporation, sur un Macintosh IIsi.

Le Chapitre 4 est dédié à l'analyse des données ellipsométriques de couches minces à l'interface air-eau. Différents modèles sont évalués pour interpréter la mesure et solutionner les paramètres de la couche avec analyse des différentes sources d'erreur. L'approximation des couches minces au premier ordre en  $d/\lambda$  permet un traitement analytique de plusieurs des aspects considérés.

## CHAPITRE 1

### SOLUTION POLYNOMIALE POUR L'ÉPAISSEUR ET L'INDICE DE RÉFRACTION D'UNE COUCHE TRANSPARENTE UNIQUE

**L'équation ellipsométrique.** La recherche des valeurs de l'épaisseur et de l'indice de réfraction de la couche d'un système incident-couche-substrat, alors que les autres paramètres sont connus, est un problème d'intérêt général en ellipsométrie. Le rapport ellipsométrique  $\rho$  mesuré pour une couche ayant une épaisseur  $d_1$  et un indice  $n_1$ , et placée entre un substrat d'indice  $n_2$  et un milieu incident d'indice  $n_0$ , est donné par la méthode matricielle<sup>24</sup> (où  $k = 1$ ) :

$$\rho = \frac{(X r_{12p} + r_{01p})(X r_{01s} r_{12s} + 1)}{(X r_{12s} + r_{01s})(X r_{01p} r_{12p} + 1)}, \quad (1.1)$$

$$X = \exp(-2i \beta_1). \quad (1.2)$$

Lorsque  $\rho$  est mesuré expérimentalement, les seules inconnues de l'équation sont  $d_1$  et  $n_1$ . L'équation (1.1) peut s'écrire sous la forme quadratique

$$a X^2 + b X + c = 0, \quad (1.3)$$

où les coefficients sont définis comme suit :

$$a = (-r_{01s} + r_{01p} \rho) r_{12p} r_{12s}, \quad (1.4)$$

$$b = -r_{12p} - r_{01p} r_{01s} r_{12s} + \rho (r_{01p} r_{01s} r_{12p} + r_{12s}), \quad (1.5)$$

$$c = -r_{01p} + r_{01s} \rho. \quad (1.6)$$

Alors que l'épaisseur  $d_1$  n'apparaît que dans  $X$ ,  $n_1$  apparaît de façon très compliquée dans l'Eq. (1.3), à travers les coefficients  $r_{01s}$ ,  $r_{01p}$ ,  $r_{12s}$ ,  $r_{12p}$  (dans lesquels  $n_1$  est sous un radical dans  $\cos(\varphi_1)$ ) et dans la forme exponentielle définissant la variable  $X$ . Lorsque  $n_1$  est complexe, l'équation est donc transcendante pour  $n_1$ . Toutefois, dans le cas particulier où l'indice relatif  $n = n_1/n_0$  est réel, la couche est transparente puisque la partie imaginaire de l'indice de réfraction, caractérisant le coefficient d'absorption de la couche, est nulle. Le facteur  $X$  est alors de module unité ( $X X^* = 1$ ) et cette propriété est utilisée pour extraire  $X$  de l'équation, où  $X^*$  est le conjugué complexe de  $X$ .

**Méthodes numériques de résolution.** Les méthodes numériques pour résoudre l'équation ellipsométrique pour une couche sont apparues en même temps que les premiers ordinateurs, avec les travaux de McCrackin *et al.*<sup>22</sup> Depuis, plusieurs autres méthodes ont été développées en utilisant diverses approches<sup>16-21,23</sup>. Nous donnerons quelques détails sur deux de ces méthodes, celle de Reinberg<sup>20</sup> et celle de Yorio<sup>18</sup>.

La méthode de Reinberg.<sup>20</sup> Certaines méthodes numériques furent développées pour résoudre l'Eq. (1.3) pour une couche transparente. Elles utilisent la racine de l'équation quadratique pour extraire  $X$  (de module unité) de l'équation et résolvent itérativement l'Eq. (1.7) qui ne dépend plus que de  $n$  seulement. Dans

ce cas, on cherche la valeur de  $n$  solution de l'une ou l'autre des fonctions  $f_+(n)$  ou  $f_-(n)$  définies comme suit :

$$f_{\pm}(n) = \ln \left| \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \right|. \quad (1.7)$$

Cette technique est utilisée dans la méthode développée par Reinberg. Sans entrer dans les détails de calcul, la procédure est décrite ci-dessous :

1. Choisir une valeur de départ pour l'indice de réfraction  $n_{(0)}$  et l'incrément de recherche  $\Delta n$ . Comme dans la plupart des méthodes itératives, on doit fournir une valeur près de la solution exacte.
2. Assigner à  $f_{(0)}$  la valeur de  $f_+(n_{(0)})$  ou  $f_-(n_{(0)})$  qui est la plus près de zéro.
3. Assigner à  $n_{(1)}$  la valeur de  $n_{(0)} + \Delta n$ .
4. Assigner à  $f_{(1)}$  la valeur de  $f_+(n_{(1)})$  ou  $f_-(n_{(1)})$  qui est la plus près de zéro.
5. Calculer un nouvel incrément  $\Delta n$  en évaluant le zéro de la droite passant par les points  $(n_{(0)}, f_{(0)})$  et  $(n_{(1)}, f_{(1)})$ .
6. Assigner à  $n_{(0)}$  et  $f_{(0)}$  les valeurs de  $n_{(1)}$  et  $f_{(1)}$  respectivement.
7. Reprendre à 3 si le critère de convergence n'est pas satisfait.
8. Calculer l'épaisseur à partir de la solution pour  $n_{(1)}$ .

Cette méthode a l'avantage de ne dépendre que du paramètre  $n_1$  dans le processus itératif. Le désavantage est de devoir recalculer  $\cos(\varphi_1)$  et les  $r_{ijp}$  et  $r_{ijs}$  à chaque itération, en plus de choisir quelle expression (+ ou -) se rapproche le plus de l'unité. La méthode de Reinberg converge rapidement car la fonction  $f$  est passablement linéaire aux environs de la solution. Le choix de la valeur initiale

n'est donc pas critique pour obtenir la convergence. Le choix de l'intervalle de recherche doit s'appuyer sur une connaissance approximative de la couche mesurée car la fonction à solutionner est trop complexe pour estimer *a priori* la valeur de la solution.

La méthode de Yoriome.<sup>18</sup> Cette méthode utilise une approche différente pour trouver l'épaisseur de la couche dans l'équation ellipsométrique. Lorsque l'épaisseur de la couche varie, les valeurs prises par  $X$  forment un cercle de module unité et centré à l'origine dans le plan complexe. Puisque les rapports de réflexion  $R_p$  et  $R_s$ , pour un système à une couche, sont donnés par les quotients

$$R_p = \frac{X r_{12p} + r_{01p}}{X r_{12p} r_{01p} + 1}, \quad R_s = \frac{X r_{12s} + r_{01s}}{X r_{12s} r_{01s} + 1},$$

et que le numérateur et le dénominateur sont linéaires en  $X$ , alors  $R_p$  et  $R_s$  forment aussi des cercles dans le plan complexe. Si on écrit l'équation ellipsométrique sous la forme

$$\rho R_s = R_p,$$

alors les deux côtés de cette égalité représentent des cercles et l'épaisseur est un paramètre angulaire (Figure 4).

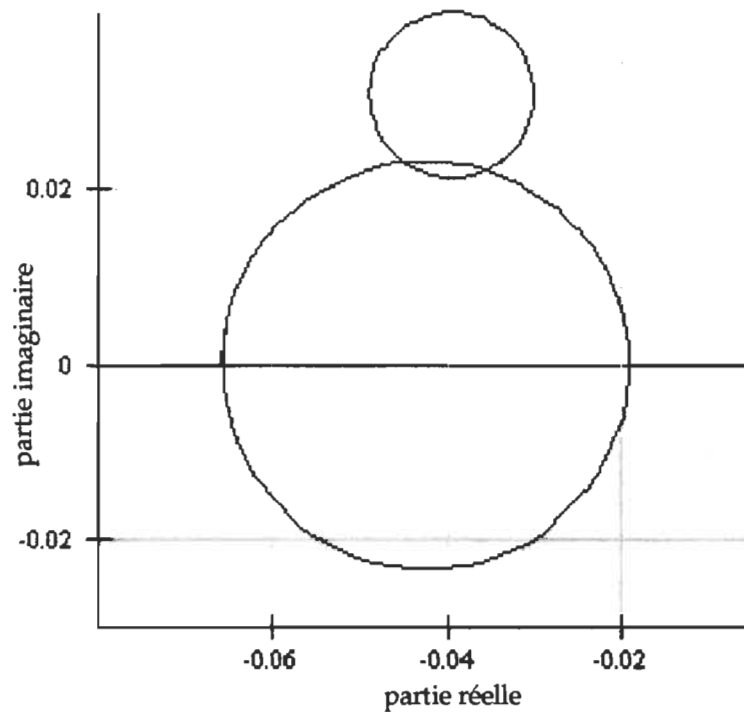


Figure 4. Exemple des deux cercles formés par l'équation ellipsométrique.

L'intersection de ces cercles dépend de la valeur de  $n_1$  et non de l'épaisseur. La méthode de Yoriune consiste à calculer l'intersection de ces deux cercles en fonction de  $n_1$  et de trouver la valeur telle que l'épaisseur sur chacun des deux cercles soit identique à l'intersection. La procédure itérative est semblable à celle de la méthode de Reinberg, excepté que la fonction à annuler est la différence d'épaisseur à l'intersection des cercles. Comme il y a deux intersections entre les cercles il faut choisir celle où la différence d'épaisseur est la plus faible.

Cette méthode a les mêmes désavantages que la méthode de Reinberg (recalculer  $\cos(\varphi_1)$  et les  $r_{ijp}$  et  $r_{ijs}$  à chaque itération), en plus de devoir calculer l'intersection de deux cercles, ce qui est assez lourd à inclure dans un processus itératif.



À l'aide de tests numériques, ces deux méthodes seront comparées à la méthode polynomiale de résolution qui sera développée dans ce chapitre.

**Solutions analytiques.** En plus des méthodes numériques, il y a eu des efforts pour établir des solutions analytiques au problème à une couche. Azzam<sup>10-12</sup> a apporté des solutions pour les cas suivants :

- a) détermination de l'indice complexe et de l'épaisseur de films immergés, (c'est-à-dire où le milieu incident est le même que le substrat) par inversion combinée des données ellipsométriques de transmission et de réflexion à un angle d'incidence de  $45^\circ$ ;
- b) détermination de l'indice complexe et de l'épaisseur de films immergés par inversion combinée des données ellipsométriques de transmission et de réflexion à un angle d'incidence quelconque;
- c) détermination de l'indice réel et de l'épaisseur de films immergés par l'inversion des données ellipsométriques de transmission à un angle d'incidence de  $45^\circ$ .

Lekner<sup>13,14</sup> a aussi été actif dans ce domaine en apportant une solution analytique aux cas suivants, qui sont des généralisations subséquentes des cas traités par Azzam (couches non immergées, angle d'incidence quelconque) :

- a) détermination de l'indice complexe et de l'épaisseur d'une couche par l'inversion des données ellipsométriques de réflexion et de transmission;

- b) détermination de l'indice réel et de l'épaisseur d'une couche par l'inversion des données ellipsométriques de transmission.

Abordons maintenant le problème d'inversion des données ellipsométriques de réflexion pour une couche transparente unique sur un substrat quelconque.

**Obtention de l'équation indépendante de l'épaisseur.** L'Eq.(1.7) exprime la condition que doivent vérifier les coefficients de l'équation quadratique afin que  $X$  soit de module unité. Une autre méthode<sup>23</sup>, peu utilisée, pour extraire  $X$  de l'équation, consiste à conjuguer l'Eq. (1.3) et, dans le cas où l'indice de réfraction est réel (et ainsi  $\beta_1$ ), à remplacer  $X^\dagger$  par  $1/X$ . On obtient alors une seconde équation quadratique pour  $X$ ,

$$c^\dagger X^2 + b^\dagger X + a^\dagger = 0. \quad (1.8)$$

L'élimination de  $X^2$  à partir des Eqs. (1.3) et (1.8) donne une solution *unique* pour  $X$ , exempte de radical et donnée par :

$$X = \frac{-b^\dagger a^\dagger + c^\dagger b^\dagger}{a^\dagger a^\dagger - c^\dagger c^\dagger}. \quad (1.9)$$

Cette solution n'est utilisable que si l'Eq. (1.3) ne possède qu'une seule racine de module unité; dans le cas contraire, un calcul de l'Eq.(1.9) donne une indétermination de la forme 0/0. Lorsque cette solution est reportée dans l'Eq. (1.3), on obtient une relation entre les coefficients  $a$ ,  $b$  et  $c$  équivalente à l'Eq (1.7), mais sans double signe ni radical

$$(-a b^{\dagger} + b c^{\dagger})^{\dagger} (-a b^{\dagger} + b c^{\dagger}) - (a a^{\dagger} - c c^{\dagger})^2 = 0. \quad (1.10)$$

Une autre façon d'obtenir l'Eq. (1.10) peut être déduite de l'Eq. (1.7) en éliminant les radicaux du produit

$$\left( \frac{-b \pm \sqrt{-4c a + b^2}}{2a} \right) \left( \frac{-b \pm \sqrt{-4c a + b^2}}{2a} \right)^{\dagger} = 1.$$

L'Eq. (1.10) dépend seulement de l'indice relatif  $n$  et ne dépend plus de l'épaisseur  $d_1$ . Cette équation, d'abord étudiée numériquement par Charlot et Maruani<sup>23</sup>, doit être résolue pour l'indice  $n$ .

**La méthode polynomiale.** La dépendance fonctionnelle de  $n$  dans l'Eq. (1.10) demeure compliquée. Lekner<sup>25</sup> a développé un 5-nôme pour l'indice réel et l'épaisseur d'une couche sur un substrat d'indice réel, en utilisant l'Eq. (1.10). Il a publié ses résultats quelques mois à peine avant la publication du résultat de ce chapitre<sup>26</sup>. De façon indépendante, nous avons établi un 5-nôme pour le même problème, mais dans le cas plus général d'un substrat d'indice complexe.

A l'aide d'une série de substitutions, il est possible d'exprimer l'Eq. (1.10) en fonction d'une seule inconnue réelle  $t^*$ . A cet effet, posons les identités suivantes :

---

\* Désormais les coefficients de Fresnel de transmission définis en I.11 et I.12 ne seront plus utilisés et le symbole  $t$  représentera la variable du polynôme.

$$t = \frac{n_1 \cos(\varphi_1)}{n_0 \cos(\varphi)}, \quad (1.11)$$

$$x = -\tan(\varphi) \tan(\varphi_2), \quad (1.12)$$

$$y = -\frac{n_2 \cos(\varphi_2)}{n_0 \cos(\varphi)}, \quad (1.13)$$

$$z = -\frac{\rho - 1}{\rho + 1}. \quad (1.14)$$

Avec ces substitutions, les coefficients de Fresnel de réflexion et  $\rho$  deviennent

$$r_{01p} = \frac{(t - 1)(t - x y)}{(t + 1)(t + x y)}, \quad (1.15)$$

$$r_{12p} = \frac{(t + x)(t + y)}{(t - x)(t - y)}, \quad (1.16)$$

$$r_{01s} = -\frac{t - 1}{t + 1}, \quad (1.17)$$

$$r_{12s} = \frac{t + y}{t - y}, \quad (1.18)$$

$$\rho = -\frac{z - 1}{z + 1}, \quad (1.19)$$

et les coefficients  $a, b, c$  de l'Eq. (1.10) se réécrivent comme suit :

$$a = -(t + 1)(t - 1)(t + x)(t + y)^2(t + x z y) C, \quad (1.20)$$

$$b = 2(t + y)(t - y)(t^4 + [2x y + x^2 z y + 2x z + 1]t^2 + x^2 z y)C, \quad (1.21)$$

$$c = -(t + 1)(t - 1)(t - x)(t - y)^2(t - x z y)C, \quad (1.22)$$

$$C = \frac{\rho + 1}{(t + 1)^2(t - x)(t - y)^2(t + x y)}, \quad (1.23)$$

où  $C$  est un facteur commun qui peut être éliminé de l'Eq. (1.10). Lorsque  $C$  est éliminé,  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont des 6-nômes en  $t$ . Par conséquent, une expansion de l'Eq. (1.10) implique des termes de la *vingt-quatrième* puissance de  $t$ . Cela peut sembler élevé pour que le résultat puisse être de quelque utilité, mais fort heureusement, à cause surtout de la symétrie de signe entre  $a$  et  $c$ , plusieurs termes se simplifient lors de l'expansion de l'Eq. (1.10). L'expansion explicite du polynôme et des simplifications qui surviennent sont données dans l'Appendice A. De façon inattendue, la forme finale est un 5-nôme à coefficients réels dont la variable est la constante diélectrique relative de la couche  $\varepsilon = n^2$ .

L'équation à résoudre est donc

$$k_5 \varepsilon^5 + k_4 \varepsilon^4 + k_3 \varepsilon^3 + k_2 \varepsilon^2 + k_1 \varepsilon + k_0 = 0, \quad (1.24)$$

où les coefficients  $k$  (voir Appendice A) dépendent des paramètres connus du système, c'est-à-dire de l'indice du milieu incident  $n_0$ , de l'indice du substrat  $n_2$ , de l'angle d'incidence  $\varphi$  (l'angle  $\varphi_2$  se calculant à l'aide de l'Eq. (I.13)) et de la mesure  $\rho$ . Le polynôme (1.24) a des coefficients réels et possède donc une, trois ou cinq

racines réelles. Une condition initiale associée au développement du polynôme (1.24) est que  $t$  soit réel, ou de façon équivalente, le paramètre  $\varepsilon$  doit vérifier  $\varepsilon \geq \sin^2(\varphi)$ . Donc, seules les racines réelles du polynôme où  $\varepsilon \geq \sin^2(\varphi)$  satisfont que  $X X^* = 1$ . Le cas où  $\varepsilon < \sin^2(\varphi)$ , soit la condition d'angle critique pour la réflexion totale interne, est abordé séparément dans la prochaine section.

Pour chaque racine valide, on peut maintenant calculer l'indice  $n_1 = n_0 \sqrt{\varepsilon}$ . L'épaisseur se calcule en isolant  $d_1$  dans l'Eq. (1.2)

$$d_1 = \left[ \frac{1}{4} \frac{\lambda}{\pi \cos(\varphi_1) n_1} \right] i \ln(X) + \frac{1}{2} \frac{m \lambda}{\cos(\varphi_1) n_1}, \quad (1.25)$$

où  $m$  est un entier choisi pour que l'épaisseur soit positive et physiquement raisonnable. Pour calculer  $X$ , on peut utiliser les Eqs. (1.4)-(1.6) et (1.9), mais nous présentons à l'Appendice A une autre façon plus directe que de calculer tous les coefficients de Fresnel.

### Cas particuliers.

Condition d'angle critique de la couche. Lorsque l'indice de la couche est inférieur à l'indice du milieu incident,  $\cos(\varphi_1)$  est alors un nombre imaginaire pur pour les angles d'incidence  $\varphi$  plus grands que l'angle critique  $\varphi_c = \arcsin(n)$  de la couche. De façon équivalente, cela signifie que  $\varepsilon < \sin^2(\varphi)$ . Il n'y a pas dans ce cas de réflexion totale interne dans la couche à cause de son épaisseur finie. Dans une telle situation,  $X$  n'est plus de module unité mais est réel, contrairement aux hypothèses de départ pour le développement du précédent polynôme. Un

développement polynomial similaire peut être fait pour ce cas. Lorsque  $X$  est réel, la conjugaison de l'Eq. (1.3) donne

$$X^2 a^\dagger + X b^\dagger + c^\dagger = 0. \quad (1.26)$$

L'élimination de  $X^2$  dans (1.3) et (1.26) donne la solution réelle  $X$  suivante :

$$X = \frac{c^\dagger a - c a^\dagger}{b a^\dagger - a b^\dagger}. \quad (1.27)$$

La condition sur les coefficients pour que l'Eq. (1.3) ait une solution réelle devient alors

$$(c^\dagger b - c b^\dagger)(-b a^\dagger + a b^\dagger) - (c^\dagger a - c a^\dagger)^2 = 0. \quad (1.28)$$

Un polynôme pour cette équation peut être développé de la même manière que pour l'Eq. (1.10). Ce faisant, on obtient *exactement le même polynôme* dans les deux cas. Conséquemment, il y a un seul polynôme à résoudre même dans le cas où  $\varepsilon < \sin^2(\varphi)$ . Bien que le calcul de  $X$  se fasse différemment dans les deux cas, Eqs. (1.9) et (1.27), la façon de calculer  $X$  développée dans l'Appendice A est indépendante de la condition d'angle critique.

Réflexion totale interne pour le substrat. Lorsque l'indice du substrat est réel et que l'angle d'incidence est plus élevé que l'angle critique, la lumière incidente est totalement réfléchiée par le substrat et la mesure de  $\Psi$  est par conséquent toujours  $45^\circ$ . L'information sur la couche est alors donnée seulement par la mesure de  $\Delta$  et l'on ne peut dans ce cas s'attendre à résoudre les équations à

la fois pour l'épaisseur et l'indice de la couche. Dans ce cas, tous les coefficients du polynôme s'annulent et toute valeur de  $\varepsilon$  annule le polynôme. Pour une constante diélectrique connue  $\varepsilon$ , l'Eq. (1.25) donne alors la valeur de l'épaisseur qui correspond au  $\Delta$  expérimental.

Couche entre deux milieux identiques d'indice réel. Ce système particulier possède une solution analytique connue et la constante diélectrique  $\varepsilon$  doit satisfaire l'équation du troisième degré<sup>9</sup>

$$a_3 \varepsilon^3 + a_2 \varepsilon^2 + a_1 \varepsilon + a_0 = 0,$$

où les coefficients, exprimés à l'aide des substitutions introduites précédemment et en prenant en compte la convention des signes, qui diffère de celle proposée en [9], sont donnés par

$$a_3 = -\frac{-(z + z^\dagger)x + 2x - 4}{(x - 1)^2(z + 1)(z^\dagger + 1)},$$

$$a_2 = \frac{2z z^\dagger x^3 - 4z z^\dagger x^2 + 2x^2 + (z + z^\dagger)(-x^2 + 5x - 6)x - 4}{(x - 1)^3(z + 1)(z^\dagger + 1)},$$

$$a_1 = \frac{[(z + z^\dagger)[2x^2 - 5x - 1] - 4z z^\dagger x + 2x - 6]x}{(z + 1)(z^\dagger + 1)(x - 1)^3},$$

$$a_0 = -\frac{x^2(x z + z + x z^\dagger + 2x z z^\dagger + z^\dagger + 2)}{(x - 1)^3(z + 1)(z^\dagger + 1)}.$$



Il est intéressant de comparer cette solution avec le polynôme. Lorsque l'indice du substrat est réel, les coefficients  $k$  du polynôme ont un facteur commun qui est  $(y^2 - 1)$ . De plus, lorsque l'indice du milieu incident est identique à celui du substrat,  $y$  prend la valeur de -1, ce qui annule tous les coefficients du polynôme dans ce cas particulier.

Après élimination du facteur commun, les coefficients du polynôme sont non nuls et on peut calculer *cinq* solutions pour  $\varepsilon$ . Toutefois, d'après l'équation cubique, le système doit posséder un maximum de *trois* solutions. Les deux racines supplémentaires peuvent être identifiées en divisant le 5-nôme par l'équation cubique. Ce faisant, les deux polynômes se divisent exactement, démontrant ainsi qu'ils ont trois racines communes, celles de l'équation cubique.

Il est ainsi démontré que le 5-nôme, développé pour le cas général, contient les solutions pour ce cas particulier. Le résultat de la division polynomiale est une équation quadratique contenant les solutions supplémentaires. Une première solution est  $\varepsilon = 1$ , ce qui correspond à une absence de couche; la seconde solution est réelle et dépend de l'angle d'incidence par  $x$  et de la couche par  $z$ . Cette seconde solution est

$$\varepsilon = \frac{(z x + z^\dagger x + 2z z^\dagger x + z + z^\dagger + 2)x}{z x^2 + z^\dagger x^2 - 2z z^\dagger x^2 - 3z x - 3z^\dagger x + 2x - 4}$$

et ne vérifie pas *a priori* la condition  $XX^\dagger = 1$ , à moins de le démontrer. Des tests numériques ont montré que cette hypothèse est fausse.

**Tests numériques.** Le comportement numérique de la méthode polynomiale a été éprouvé et comparé avec celui de deux autres méthodes de résolution, celle de Yoriome<sup>18</sup> et celle de Reinberg<sup>20</sup>. Pour obtenir une bonne base de comparaison, la méthode polynomiale a été restreinte à la recherche d'une seule racine, à partir d'une valeur initiale, comme c'est le cas pour les deux autres méthodes. Avec cette restriction, il a été constaté qu'il est plus rapide de résoudre le 6-nôme en  $s$  donné dans l'Eq. (A.15) que le 5-nôme en  $\varepsilon$ . Ce 6-nôme constitue l'avant-dernière étape du développement du 5-nôme, ce dernier étant obtenu en extrayant la racine  $\varepsilon = 0$  du 6-nôme.

Les trois méthodes ont été programmées en Pascal (voir Appendice D), en utilisant la double précision pour tous les nombres. Les programmes ont été exécutés sur un ordinateur IBM PS/2 30 286 équipé d'un coprocesseur mathématique. Nous avons utilisé un des exemples donnés par Yoriome pour une couche d'oxyde de silicium sur silicium. Les trois méthodes ont été initialisées avec un indice de 1,4 et un incrément de 0,1. Les résultats comparatifs sont montrés dans le Tableau 1.

La méthode polynomiale est supérieure à la fois en temps d'exécution et en précision. La précision indiquée est celle de la méthode d'inversion, indépendamment des erreurs de mesure. Elle est définie par le nombre de décimales des  $\Psi$  et  $\Delta$  donnés au départ qui sont reproduites par les valeurs calculées de la solution.

Tableau 1.

Résultats comparatifs pour différentes méthodes d'inversion : Solution pour l'oxyde de silicium sur substrat de silicium. Selon une mesure de  $\Psi = 14,27^\circ$ , une mesure de  $\Delta = 137,45^\circ$ , un angle d'incidence de  $70,0^\circ$ , une longueur d'onde de 546,1 nm, un indice ambiant de 1,00 et un indice de substrat de 4,08 - 0,028i.

Méthode	Polynomiale	Yoriume	Reinberg
Indice	1,5115	1,5114	1,5110
Epaisseur (nm)	14,46	14,46	14,46
Temps d'exécution (ms)	7,5	16,8	9,9
Précision (décimales)	13	6	5

En utilisant un critère de convergence plus fin, la méthode de Yoriume est aussi précise que la méthode polynomiale; le temps d'exécution augmente alors à 22,8 ms. Ces résultats ne concordent pas avec la conclusion de Yoriume qui stipule que la méthode de Reinberg est plus lente. Cette différence peut être imputée à l'utilisation de langages et d'ordinateur différents.

Les solutions possibles avec des indices et des épaisseurs réels se calculent en 12 ms à l'aide du 5-nôme en  $\epsilon$ . Les résultats sont montrés au Tableau 2. Les solutions complexes 3, 4 et 5 sont écartées. La solution 2 est mathématiquement valide et correspond bien aux angles  $\Psi$  et  $\Delta$  mesurés. Elle doit toutefois être écartée pour deux raisons physiques : l'indice de réfraction est trop faible par rapport à l'air et l'épaisseur est négative ( $m$  doit être nul dans ce cas puisque  $\epsilon < \sin^2(\varphi)$ ). La solution 1 est donc la seule qui correspond à la mesure.

*Tableau 2.*

Les cinq solutions polynomiales pour la même mesure.

Solution	Indice	Épaisseur (nm)
1	1,5115	$14,46 + 230,64m$
2	0,5936	-3,89
3	$0,0761i$	$7,44 - 14,48i$
4	$3,5039 - 1,1015i$	$28,90 - 14,36i$
5	$3,5039 + 1,1015i$	$28,90 + 14,36i$

Lorsque la méthode polynomiale est utilisée pour inverser des données générées par ordinateur, elle ne montre pas d'erreur significative ni de problème de convergence, même pour des cas extrêmes où  $d/\lambda = 10^{-6}$  ou  $\varphi = 0,01^\circ$  ou  $89,99^\circ$ . Le système de substrat de silicium a été résolu pour un grand nombre (plusieurs millions) de valeurs aléatoires de  $\Psi$  et  $\Delta$  dans leurs intervalles respectifs, l'inversion a été précise pour la majorité des cas. Toutefois, pour quelques valeurs des angles ellipsométriques, le polynôme a démontré quelques difficultés couramment rencontrées dans la solution de polynômes, i.e. lorsque  $k_5 \approx 0$  ou lorsque deux racines sont presque égales. Une bonne procédure de solution doit donc tenir compte de ces cas spéciaux. Pour chaque  $(\Psi, \Delta)$  testé, au moins une solution a été trouvée avec un indice de réfraction plus grand que l'unité.

**Analyse de propagation d'erreur.** L'on peut utiliser la méthode polynomiale pour calculer l'effet des erreurs de mesure sur les solutions. La Figure 5 montre le domaine de solutions lorsqu'une erreur de  $\pm 0,05^\circ$  est incluse à la mesure de  $\Psi$  et  $\Delta$  pour le système oxyde de silicium-silicium de la section précédente. L'indice se

calculé à  $1,512 \pm 0,044$  et l'épaisseur à  $14,51 \pm 0,52$  nm. D'après cette figure, le système est plus sensible aux erreurs en  $\Psi$  qu'en  $\Delta$  pour cet angle d'incidence.

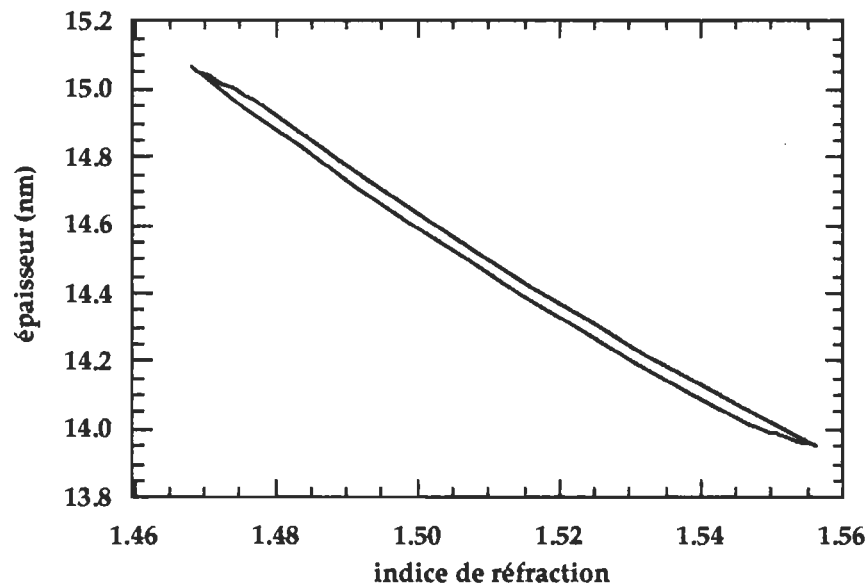


Figure 5. Domaine de solutions lorsqu'une erreur de  $\pm 0,05^\circ$  est incluse à la mesure de  $\Psi$  et  $\Delta$  pour le système oxyde de silicium-silicium.

Le même système ( $n_1 = 1,5115$ ;  $d = 14,46$  nm) a été simulé pour des angles d'incidence variant de  $0^\circ$  à  $90^\circ$  pour voir le comportement des solutions. Le système possède seulement deux racines réelles dans cet intervalle et, comme il fallait s'y attendre, la solution vraie est stable de  $0^\circ$  à  $90^\circ$ . La seconde racine n'a pas de signification physique mais est aussi très stable sur l'intervalle d'angles d'incidence, l'indice augmentant de façon monotone de 0,581 près de  $0^\circ$  à 0,595 près de  $90^\circ$ . L'angle critique pour cette racine est d'environ  $36^\circ$ ; au-dessus de cet angle l'épaisseur correspondante est négative de -3,75 nm à -3,92 à  $90^\circ$ . Sous

l'angle critique, l'épaisseur est grande et positive, croissant de 466 nm près de  $0^\circ$  jusqu'à une valeur infinie à l'approche de l'angle critique.

Comme dans la référence 9, les Figures 6 et 7 montrent les résultats du processus d'inversion sur l'indice et l'épaisseur lorsque, avant l'inversion, une erreur aléatoire uniforme de  $\pm 0,1^\circ$  en  $\Psi$  et de  $\pm 0,2^\circ$  en  $\Delta$  est ajoutée aux valeurs calculées. Les racines ayant un indice réel et une épaisseur positive y sont montrées.

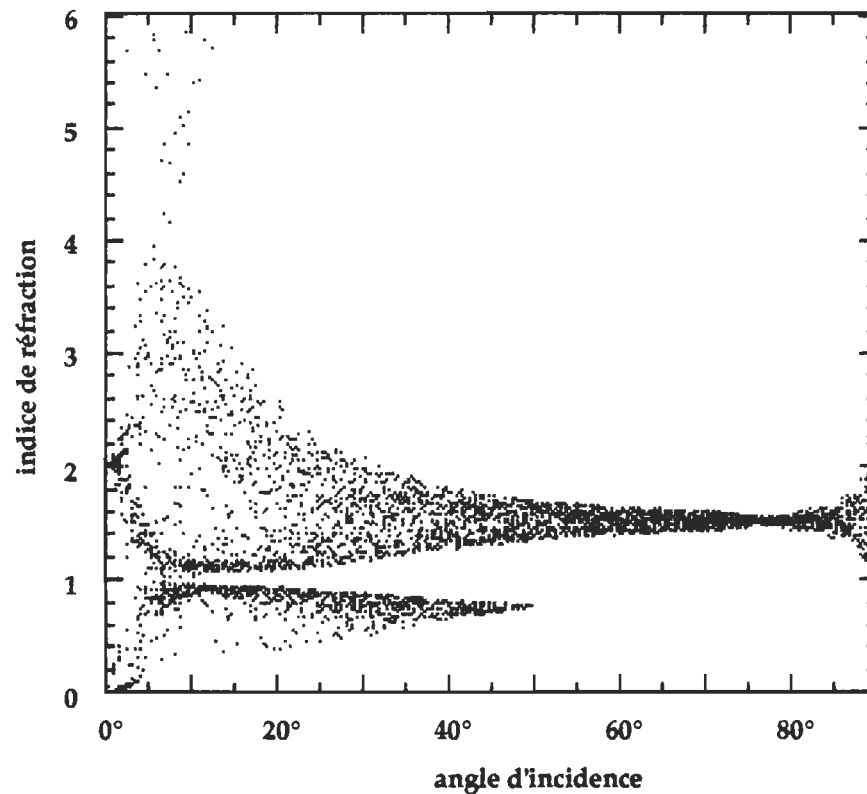


Figure 6. Etalement des indices de réfraction produit par les solutions du polynôme lorsque des erreurs aléatoires sont introduites dans les données ellipsométriques simulées. Les erreurs sont distribuées uniformément entre  $\pm 0,1^\circ$  en  $\Psi$  et  $\pm 0,2^\circ$  en  $\Delta$ .

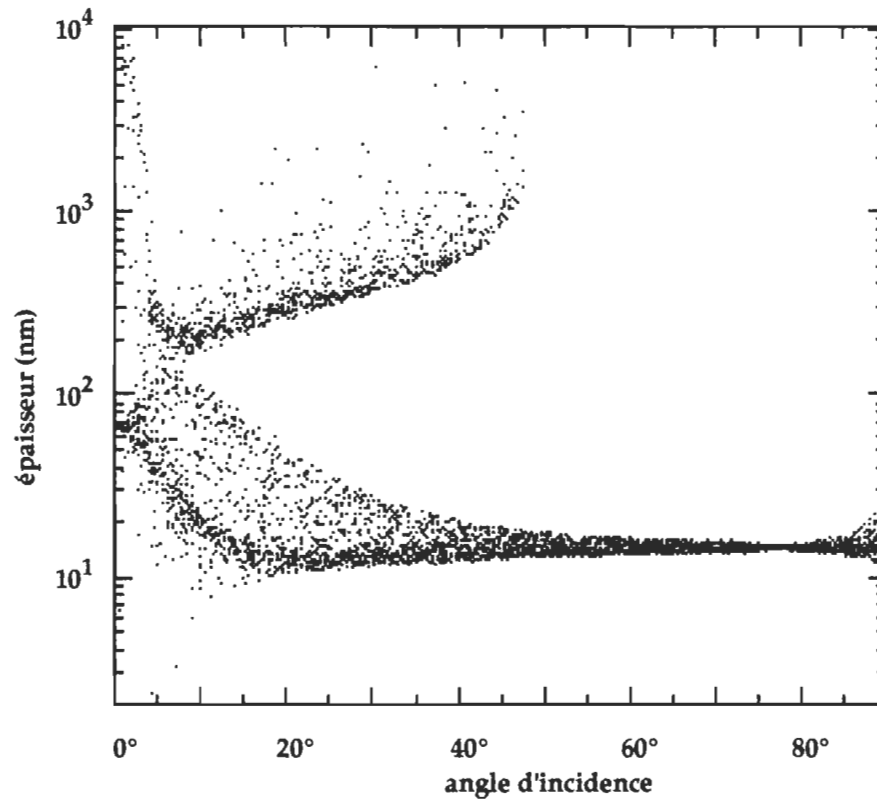


Figure 7. Etalement des épaisseurs relié aux indices de réfraction de la Figure 6.

On peut souligner les principales caractéristiques suivantes :

- a) il y a un angle d'erreur minimale près de 70°;
- b) sous 50° d'incidence, une épaisseur positive est possible pour la solution à faible indice de réfraction;

- c) l'étalement des épaisseurs possibles impose une échelle logarithmique à la Figure 7. Ces grandes épaisseurs sont associées à la solution à faible indice et sont attribuables à une grande période d'épaisseur;
- d) sous  $15^\circ$  d'incidence, une troisième solution réelle apparaît (les points ayant un indice de réfraction supérieur à 4,0 sur la Figure 6) avec un grand indice et une faible épaisseur. Le domaine d'indices de cette racine s'étend jusqu'à l'infini;
- e) aux faibles angles d'incidence, c'est-à-dire près de la normale, l'étalement des solutions n'est pas uniforme malgré une erreur uniforme. Ceci indique alors que les solutions dépendent de façon fortement non linéaire des erreurs introduites;
- f) la résolution est considérablement réduite aux faibles angles d'incidence, lorsque les différents domaines d'erreur se fondent en un seul grand domaine.



## CHAPITRE 2

### SOLUTION POLYNOMIALE POUR L'ÉPAISSEUR ET L'INDICE DE RÉFRACTION D'UNE COUCHE TRANSPARENTE DANS UN SYSTÈME DE MULTICOUCHES

Le problème abordé dans ce chapitre est une généralisation de celui résolu au chapitre précédent. La couche, dont l'indice de réfraction et l'épaisseur sont inconnus, n'est pas unique sur le substrat mais fait partie d'un système de multicouches dont tous les autres paramètres sont connus. Comme dans le cas précédent, la principale difficulté pour la résolution des équations ellipsométriques réside dans le fait que l'inconnue, ici l'indice de réfraction  $n_j$  de la  $j$ ème couche, y apparaît de façon très compliquée. Le polynôme pour la couche unique n'a pu être obtenu qu'après que l'équation ait été reformulée en termes d'une seule inconnue,  $t$ . On procède de la même façon pour résoudre ce problème dans le cas d'une couche faisant partie d'un système de multicouches. Pour ce faire, les équations matricielles seront reformulées et présentées à l'aide d'une seule inconnue.

**Modification de la méthode matricielle.** La première étape consiste à isoler mathématiquement des autres couches toute l'information concernant la couche inconnue. Les matrices  $I_{ij}$  (Eq. I.2) caractérisant l'interface  $ij$  peuvent être séparées en produit de deux matrices, l'une ne dépendant que du milieu  $i$  et l'autre ne dépendant que du milieu  $j$ . Pour la polarisation  $s$  on a

$$I_{ijs} = I'_{is} I''_{js}, \quad (2.1)$$

où

$$I'_{i s} = \frac{1}{2} \frac{1}{n_i \cos(\varphi_i)} \begin{pmatrix} n_i \cos[\varphi_i] & 1 \\ n_i \cos[\varphi_i] & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

$$I''_{j s} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ n_j \cos[\varphi_j] & -n_j \cos[\varphi_j] \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

et pour la polarisation  $p$  ces matrices sont

$$I_{i j p} = I'_{i p} I''_{j p}, \quad (2.4)$$

$$I'_{i p} = \frac{1}{2} \frac{1}{n_i \cos(\varphi_i)} \begin{pmatrix} \cos[\varphi_i] & n_i \\ \cos[\varphi_i] & -n_i \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

$$I''_{j p} = \begin{pmatrix} n_j & n_j \\ \cos[\varphi_j] & -\cos[\varphi_j] \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

En multipliant les trois matrices  $I'_{j p}$ ,  $B_j$  et  $I'_{j s}$ , cette séparation permet d'exprimer en une seule matrice par polarisation la contribution d'une couche dans un système de multicouches

$$B'_{j s} = I''_{j s} B_j I'_{j s}, \quad (2.7)$$

$$B'_{j p} = I''_{j p} B_j I'_{j p}. \quad (2.8)$$

Après multiplication des matrices et quelques manipulations algébriques et trigonométriques ces matrices  $B'_j$  s'expriment comme

$$B'_{j s} = \begin{pmatrix} \cos[\beta_j] & \frac{i \sin[\beta_j]}{n_j \cos[\varphi_j]} \\ n_j i \cos[\varphi_j] \sin[\beta_j] & \cos[\beta_j] \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

$$B'_{j p} = \begin{pmatrix} \cos[\beta_j] & \frac{n_j i \sin[\beta_j]}{\cos[\varphi_j]} \\ \frac{i \cos[\varphi_j] \sin[\beta_j]}{n_j} & \cos[\beta_j] \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Avec ces nouvelles définitions, les matrices (I.1) se calculent maintenant comme

$$S_s = I'_{0s} \left[ \prod_{j=1}^k B'_{j s} \right] I''_{(k+1)s}, \quad (2.11)$$

$$S_p = I'_{0p} \left[ \prod_{j=1}^k B'_{j p} \right] I''_{(k+1)p}. \quad (2.12)$$

Dans ces dernières équations, l'indice  $n_j$  se retrouve sous un radical dans  $\cos(\varphi_j)$  (Eq (I.13)) et dans  $\cos(\beta_j)$  et  $\sin(\beta_j)$ . Comme dans le chapitre précédent, nous ferons des changements de variables pour éliminer les radicaux et exprimer explicitement les matrices en fonction de seulement deux paramètres par couche,  $t_j$  et  $X_j$ , et où  $X_j$  pourra ultérieurement être éliminé. Malgré l'usage des mêmes symboles dans la notation, ces changements de variables sont différents de ceux effectués au Chapitre 1, c'est-à-dire que l'on n'obtiendra pas les mêmes équations pour la couche unique en posant  $k=1$  dans la notation utilisée pour le système de multicouches. Ces changements de variables sont :

$$t_j = n_j \cos(\varphi_j), \quad (2.13)$$

$$\varepsilon_j = n_j^2 = t_j^2 + q, \quad (2.14)$$

$$q = n_0^2 (\sin[\varphi])^2, \quad (2.15)$$

$$X_j = e^{-2i\beta_j}, \quad (2.16)$$

$$\sin(\beta_j) = -\frac{1}{2}i e^{i\beta_j}(-X_j + 1), \quad (2.17)$$

$$\cos(\beta_j) = \frac{1}{2}e^{i\beta_j}(X_j + 1). \quad (2.18)$$

Les matrices  $S$  et  $B'_j$  deviennent alors

$$B'_{js} = \frac{1}{2} \frac{e^{i\beta_j}}{t_j} \begin{pmatrix} [X_j + 1]t_j & -X_j + 1 \\ [-X_j + 1]t_j^2 & [X_j + 1]t_j \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

$$B'_{jp} = \frac{1}{2} \frac{e^{i\beta_j}}{t_j \varepsilon_j} \begin{pmatrix} [X_j + 1]t_j \varepsilon_j & [-X_j + 1]\varepsilon_j^2 \\ [-X_j + 1]t_j^2 & [X_j + 1]t_j \varepsilon_j \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

$$S_s = \frac{1}{2} \frac{1}{t_0} \begin{pmatrix} t_0 & 1 \\ t_0 & -1 \end{pmatrix} \left( \prod_{j=1}^k B'_{js} \right) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ t_{k+1} & -t_{k+1} \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

$$S_p = \frac{1}{2} \frac{1}{n_0 t_0} \begin{pmatrix} t_0 & \varepsilon_0 \\ t_0 & -\varepsilon_0 \end{pmatrix} \left( \prod_{j=1}^k B'_{jp} \right) \frac{1}{n_{k+1}} \begin{pmatrix} \varepsilon_{k+1} & \varepsilon_{k+1} \\ t_{k+1} & -t_{k+1} \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Rappelons que le rapport ellipsométrique  $\rho$  dépend du *rapport* entre les éléments des matrices  $S_p$  et  $S_s$ ,

$$\rho = \frac{(S_p)_{21} (S_s)_{11}}{(S_p)_{11} (S_s)_{21}}. \quad (2.23)$$

Conséquemment, pour ce problème spécifique, on peut éliminer du calcul des matrices tous les facteurs scalaires qui leur sont communs, et obtenir la même valeur de  $\rho$ . De plus, seuls les éléments de la première colonne étant utilisés, on peut aussi diminuer le calcul de moitié en ne conservant que la première colonne de la première matrice à droite. Après simplification, ces matrices modifiées, de dimension  $2 \times 1$ , sont données par

$$S'_{\text{ } s} = \begin{pmatrix} t_0 & 1 \\ t_0 & -1 \end{pmatrix} \left[ \prod_{j=1}^k \begin{pmatrix} \{X_j + 1\} t_j & -X_j + 1 \\ \{-X_j + 1\} t_j^2 & \{X_j + 1\} t_j \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 1 \\ t_{k+1} \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

$$S'_{\text{ } p} = \begin{pmatrix} t_0 & \varepsilon_0 \\ t_0 & -\varepsilon_0 \end{pmatrix} \left[ \prod_{j=1}^k \begin{pmatrix} \{X_j + 1\} t_j \varepsilon_j & \{-X_j + 1\} \varepsilon_j^2 \\ \{-X_j + 1\} t_j^2 & \{X_j + 1\} t_j \varepsilon_j \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \varepsilon_{k+1} \\ t_{k+1} \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Le calcul de  $\rho$  s'effectue à l'aide du quotient

$$\rho = \frac{S'_{2p} S'_{1s}}{S'_{1p} S'_{2s}}. \quad (2.26)$$

En utilisant la relation (2.14) pour  $\varepsilon_j$ , les matrices  $S'$  ne dépendent plus que des  $t_j$  et  $X_j$  et on peut maintenant développer la forme polynomiale pour une couche quelconque du système.

**Développement du polynôme.** Supposons que l'on connaisse les épaisseurs et les indices de réfraction de toutes les couches du système, sauf une, et les indices du milieu incident et du substrat. Après une mesure ellipsométrique, les seules inconnues du système sont les paramètres  $t$  et  $X$  de la couche. Afin de simplifier l'écriture, on omettra dorénavant les indices pour cette couche. En calculant toutes les matrices connues du système, on obtient les expressions

$$S'_{\text{ } s} = \begin{pmatrix} u_{11s} & u_{12s} \\ u_{21s} & u_{22s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [X + 1]t & -X + 1 \\ [-X + 1]t^2 & [X + 1]t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11s} \\ v_{21s} \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

$$S'_{\text{ } p} = \begin{pmatrix} u_{11p} & u_{12p} \\ u_{21p} & u_{22p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [X + 1]\varepsilon t & [-X + 1]\varepsilon^2 \\ [-X + 1]t^2 & [X + 1]\varepsilon t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11p} \\ v_{21p} \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

où les  $u$  et  $v$  sont des coefficients scalaires. Après multiplication matricielle, on obtient

$$S'_{\ p} = \begin{pmatrix} \alpha_1 X + \alpha_2 \\ \alpha_3 X + \alpha_4 \end{pmatrix} \quad S'_{\ s} = \begin{pmatrix} \alpha_5 X + \alpha_6 \\ \alpha_7 X + \alpha_8 \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

où les  $\alpha$  sont des polynômes en  $t$

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= -\alpha_{10}\varepsilon^2 - \alpha_{12}t^2 + \alpha_{11}\varepsilon t & \alpha_{10} &= u_{11p} v_{21p} \\ \alpha_2 &= \alpha_{10}\varepsilon^2 + \alpha_{12}t^2 + \alpha_{11}\varepsilon t & \alpha_{11} &= u_{12p} v_{21p} + u_{11p} v_{11p} \\ & & \alpha_{12} &= u_{12p} v_{11p}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= -\alpha_{30}\varepsilon^2 - \alpha_{32}t^2 + \alpha_{31}\varepsilon t & \alpha_{30} &= u_{21p} v_{21p} \\ \alpha_4 &= \alpha_{30}\varepsilon^2 + \alpha_{32}t^2 + \alpha_{31}\varepsilon t & \alpha_{31} &= u_{22p} v_{21p} + u_{21p} v_{11p} \\ & & \alpha_{32} &= u_{22p} v_{11p}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \alpha_5 &= -\alpha_{52}t^2 + \alpha_{51}t - \alpha_{50} & \alpha_{50} &= u_{11s} v_{21s} \\ \alpha_6 &= \alpha_{52}t^2 + \alpha_{51}t + \alpha_{50} & \alpha_{51} &= u_{12s} v_{21s} + u_{11s} v_{11s} \\ & & \alpha_{52} &= u_{12s} v_{11s}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\alpha_7 = -\alpha_{72}t^2 + \alpha_{71}t - \alpha_{70} \quad \alpha_{70} = u_{21s} v_{21s}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_8 &= \alpha_{72} t^2 + \alpha_{71} t + \alpha_{70} & \alpha_{71} &= u_{22s} v_{21s} + u_{21s} v_{11s} \\
\alpha_{72} &= u_{22s} v_{11s} .
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Comme dans le cas d'une couche unique, l'équation ellipsométrique suivante,

$$\rho_{S'1p} \rho_{S'2s} - \rho_{S'2p} \rho_{S'1s} = 0, \tag{2.34}$$

est quadratique en  $X$

$$a X^2 + b X + c = 0.$$

Ses coefficients sont

$$\begin{aligned}
a &= -\alpha_5 \alpha_3 + \alpha_7 \alpha_1 \rho, \\
b &= -\alpha_5 \alpha_4 - \alpha_6 \alpha_3 + \alpha_7 \alpha_2 \rho + \alpha_8 \alpha_1 \rho, \\
c &= -\alpha_6 \alpha_4 + \alpha_8 \alpha_2 \rho.
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Ces coefficients  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont des 6-nômes en  $t$  :

$$\begin{aligned}
a &= a_6 t^6 + a_5 t^5 + a_4 t^4 + a_3 t^3 + a_2 t^2 + a_1 t + a_0, \\
b &= 2 \left( -a_6 t^6 + b_4 t^4 + b_2 t^2 - a_0 \right), \\
c &= a_6 t^6 - a_5 t^5 + a_4 t^4 - a_3 t^3 + a_2 t^2 - a_1 t + a_0.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Comme dans le chapitre précédent, afin que  $X$  soit de module unité  $t$  doit vérifier la condition suivante,

$$(a a^\dagger - c c^\dagger)^2 - (-b a^\dagger + c b^\dagger)(-a b^\dagger + b c^\dagger) = 0. \quad (2.37)$$

Les définitions des coefficients  $a_0 \dots a_6$ ,  $b_2$  et  $b_4$ , ainsi que le développement de l'Eq (2.37) en un polynôme sont présentés dans l'Appendice B. Le polynôme final est du septième degré. La symétrie de signe entre  $a$  et  $c$  et la parité de  $b$  fait en sorte que le polynôme développé pour  $X = 1/X^\dagger$  est valide quelle que soit la condition d'angle critique.

**Cas particulier où la première couche est inconnue.** Dans ce cas particulier où la couche de paramètres inconnus est la première au-dessus de toutes les autres ( $l = 1$ ), on a

$$\begin{pmatrix} u_{11s} & u_{12s} \\ u_{21s} & u_{22s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_0 & 1 \\ t_0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} u_{11p} & u_{12p} \\ u_{21p} & u_{22p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_0 & \varepsilon_0 \\ t_0 & -\varepsilon_0 \end{pmatrix}.$$

En exprimant directement les coefficients  $a$  et  $c$  (Eq. (2.36)) en termes des  $u_{ijs/p}$  et  $v_{ijs/p}$ , on démontre que  $t_1 = t_0$  et  $t_1 = -t_0$  sont des racines communes. Comme au Chapitre 1, toute racine réelle commune à  $a$  et  $c$  est aussi une racine double du polynôme (2.37), d'où  $\varepsilon_1 = \varepsilon_0$  est une racine double du 7-nôme. Cette racine n'étant évidemment pas physiquement valide, le degré réel du polynôme se réduit à cinq dans ce cas, ce qui est le degré obtenu pour un système à une seule couche. Puisque la mesure ellipsométrique concerne fréquemment les paramètres de la couche supérieure d'un système (celle susceptible de varier lors d'une déposition, par exemple), cette réduction de degré comporte un avantage certain.



**Comportement des racines.** Le comportement des racines a été simulé sur un système de deux couches composé d'un substrat de silicium ( $n_3 = 3,88 - 0,018i$ ), superposé de couches d'oxyde de silicium ( $n_2 = 1,46$ ;  $d_2 = 104$  nm) et de nitrure de silicium ( $n_1 = 2,00$ ;  $d_1 = 122$  nm). Les deux premières colonnes du Tableau 3 montrent les solutions lorsque les paramètres de la première couche sont considérés inconnus. Il y a deux solutions physiquement acceptables, dont évidemment les paramètres de départ, trois autres solutions complexes et finalement deux solutions où  $n_1 = n_0$ , dont leur épaisseur correspondante est indéterminée. Ces deux dernières solutions sont obtenues lorsque l'on résout le 7-nôme au lieu du 5-nôme pour la première couche. Les deux dernières colonnes du Tableau 3 montrent les solutions lorsque les paramètres de la seconde couche sont considérés inconnus. Dans ce cas, deux solutions sont physiquement acceptables et les cinq autres solutions sont complexes.

A moins de disposer *a priori* d'une bonne approximation de la valeur des paramètres, il faut effectuer une autre mesure à un autre angle d'incidence pour pouvoir déterminer quelle solution correspond au système étudié. Les solutions du système ont été simulées en fonction de l'angle d'incidence.

Tableau 3.

Solutions du polynôme pour les épaisseurs d'un système à deux couches:  $n_3 = 3,88 - 0,018i$ ;  $n_2 = 1,46$ ;  $d_2 = 104 \text{ nm}$ ;  $n_1 = 2,00$ ;  $d_1 = 122 \text{ nm}$ ;  $\lambda = 632,8 \text{ nm}$ ;  $\Psi = 19,05^\circ$ ;  $\Delta = 14,57^\circ$ . Les deux premières colonnes sont les solutions lorsque la première couche est supposée inconnue. Les deux dernières sont les solutions lorsque la seconde couche est supposée inconnue.

$n_1$	$d_1(\text{nm})$	$n_2$	$d_2(\text{nm})$
2,000	122,0	1,460	104,0
1,122	330,5	1,267	138,2
$0,017+1,1i$	$-13,1-244,6i$	$2,428i$	$-37,5+60,8i$
$0,017-1,1i$	$-15,1+25,91i$	$1,845+1,362i$	$36,6+40,2i$
0,817	$-59,5+341,3i$	$1,845-1,362i$	$69,1+52,4i$
1,000	indéfinie	$0,733+0,412i$	$118,3-363,9i$
1,000	indéfinie	$0,733-0,412i$	$-30,5+41,5i$

La Figure 8 montre le comportement des indices des solutions lorsque la couche 2 est supposée inconnue. L'indice 1,46 correspondant au système simulé est stable tandis que la seconde solution varie avec l'angle d'incidence. Cette variation est suffisante pour discriminer quelle solution correspond au système avec une mesure ellipsométrique à deux angles d'incidence.

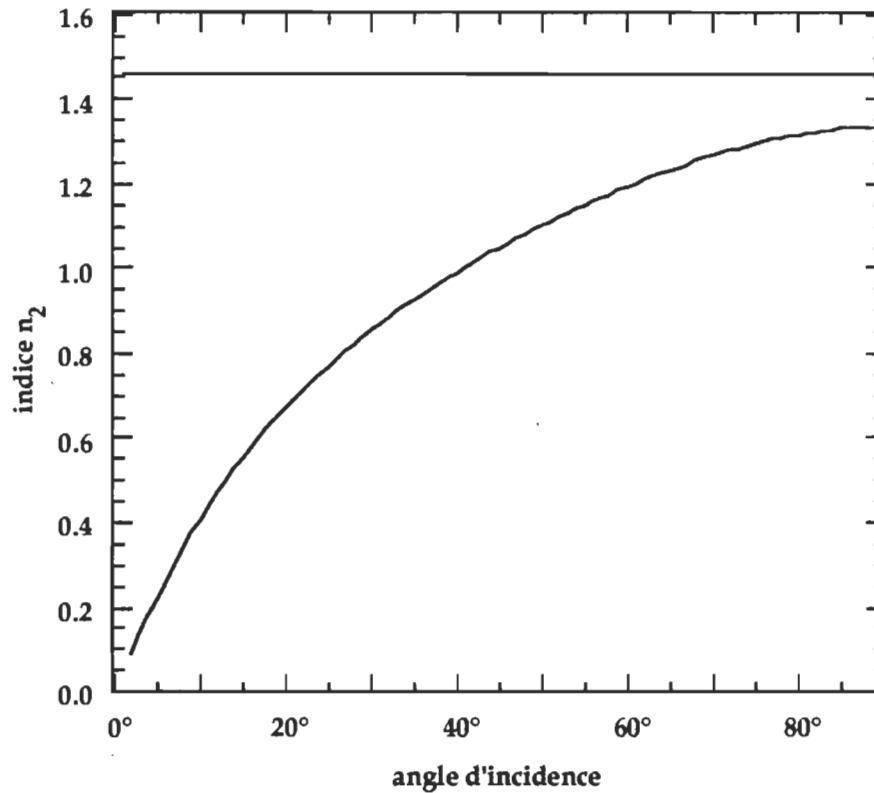


Figure 8. Variation des indices solutions de la deuxième couche en fonction de l'angle d'incidence. La solution  $n_2 = 1,46$  correspondant au système simulé est stable tandis que l'autre varie. Cette variation permet de discriminer la solution vraie avec une mesure ellipsométrique à deux angles d'incidence.

La Figure 9 montre le comportement de l'épaisseur correspondant aux indices de la Figure 8 pour le même système simulé. L'épaisseur  $d_2$  de 104 nm correspondant au système simulé est stable. L'épaisseur de l'autre solution varie rapidement en

fonction de l'angle d'incidence, comme le démontre l'échelle logarithmique utilisée.

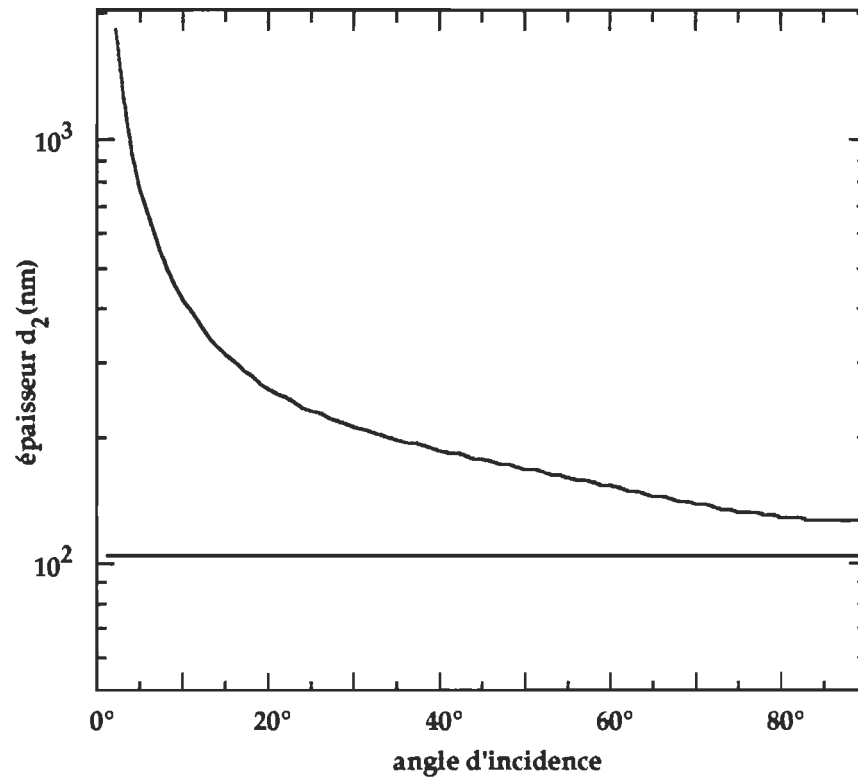


Figure 9. Les épaisseurs  $d_2$  correspondant aux indices de la Figure 8.

**Analyse de propagation d'erreur.** Comme pour le système à une seule couche, on peut utiliser la méthode polynomiale pour calculer l'effet des erreurs de mesures sur les solutions.

Les courbes des Figures 8 et 9 ont été recalculées en introduisant une erreur aléatoire uniforme de  $\pm 0,1^\circ$  en  $\Psi$  et de  $\pm 0,2^\circ$  en  $\Delta$  aux valeurs calculées. Les résultats sont démontrés à la Figure 10 pour les indices de réfraction et à la Figure 11 pour les épaisseurs. L'étalement des solutions est moins grand que pour l'exemple du Chapitre 1. Cela est dû aux épaisseurs des couches mises en cause dans les deux systèmes simulés ( $d_1 = 14,5$  nm pour le premier système et  $d_1 = 122$  nm;  $d_2 = 104$  nm pour le second). L'erreur relative est plus prononcée pour les faibles épaisseurs. On voit sur ces figures que même une erreur expérimentale volontairement exagérée n'empêche pas de discriminer les deux solutions, sauf évidemment pour les angles d'incidence très faibles.

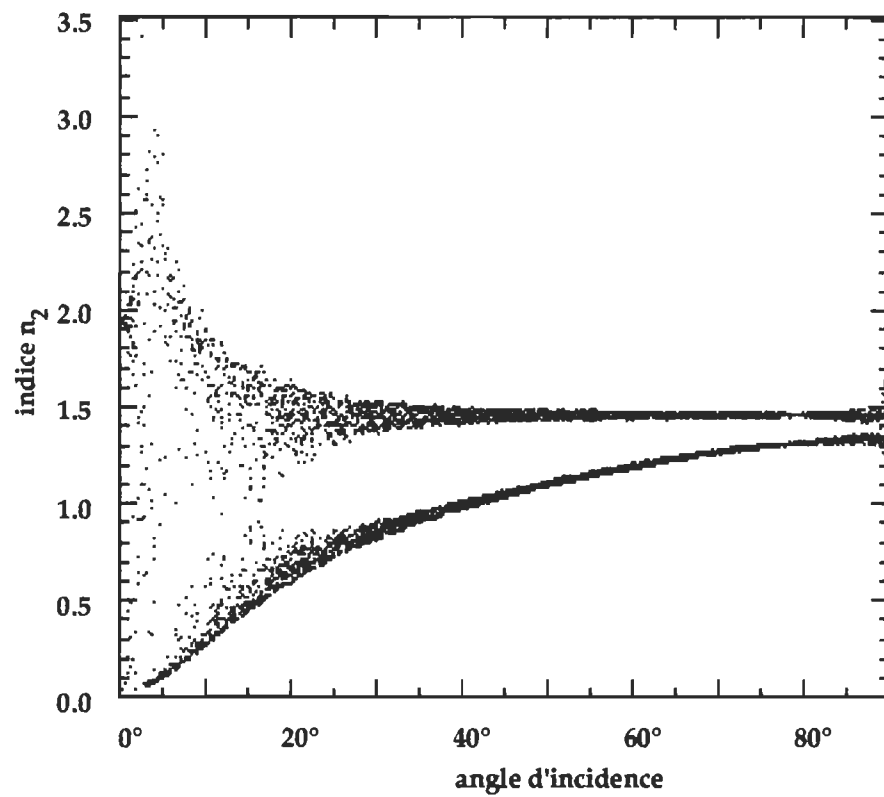


Figure 10. Etalement des indices de réfraction produit par les solutions du polynôme lorsque des erreurs aléatoires sont introduites dans les données ellipsométriques simulées. Les erreurs sont distribuées uniformément entre  $\pm 0,1^\circ$  en  $\Psi$  et  $\pm 0,2^\circ$  en  $\Delta$ .

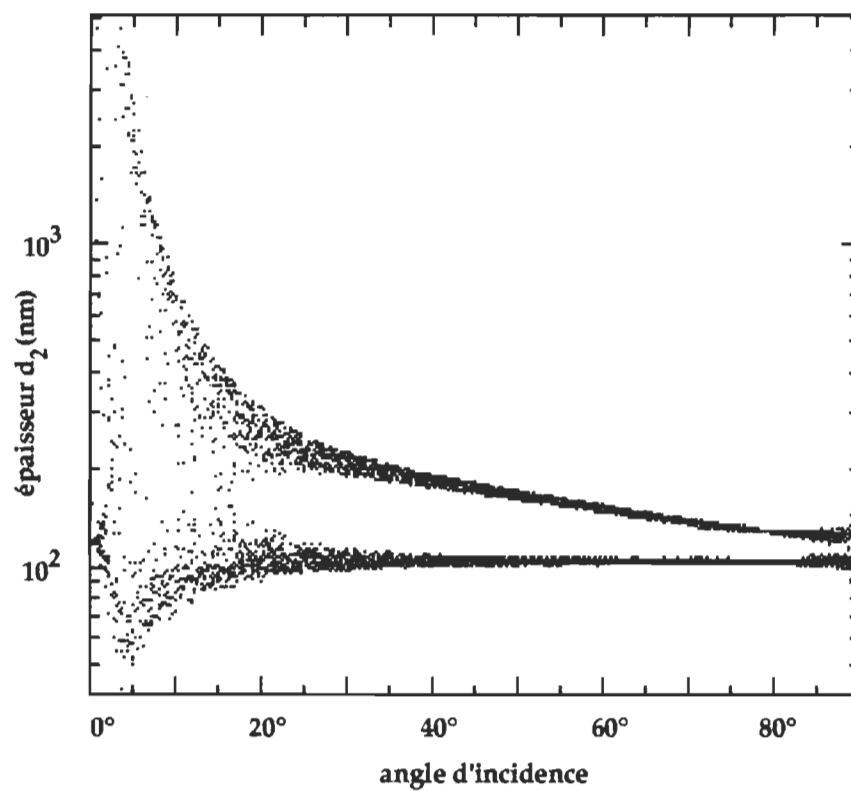


Figure 11. Etallement des épaisseurs relié aux indices de réfraction de la Figure 10.

## CHAPITRE 3

### SOLUTION POLYNOMIALE POUR L'ÉPAISSEUR DE DEUX COUCHES TRANSPARENTES DANS UN SYSTÈME DE MULTICOUCHES

Dans les deux chapitres précédents, l'équation ellipsométrique est résolue de façon polynomiale pour l'indice et l'épaisseur d'une couche transparente. Dans les deux cas, une équation de la forme

$$(-a b^{\dagger} + b c^{\dagger})^{\dagger} (-a b^{\dagger} + b c^{\dagger}) - (a a^{\dagger} - c c^{\dagger})^2 = 0 \quad (3.1)$$

est obtenue de façon à regrouper les coefficients des diverses puissances de l'inconnue, la constante diélectrique, et former un polynôme. Or l'Eq. (3.1) est une équation caractéristique du système et peut en principe être résolue pour n'importe lequel des paramètres qui y sont présents, en supposant que tous les autres paramètres soient connus, sauf peut-être l'épaisseur de la couche transparente qui a permis de déduire l'Eq. (3.1).

Nous avons démontré<sup>27</sup> qu'il y a un paramètre autre que la constante diélectrique d'une couche transparente qui dépend de façon polynomiale dans l'Eq. (3.1). En effet, l'équation ellipsométrique peut être résolue de façon polynomiale pour l'épaisseur de deux couches transparentes d'un système de multicouches.

**Dérivation du polynôme.** Supposons que l'on connaisse au départ les indices de réfraction des couches d'un système de multicouches. Les épaisseurs de ce



système sont aussi connues sauf pour la  $j$ ème et la  $l$ ème couche. Lorsque l'on considère les matrices  $S$  de l'Eq. (I.5),

$$S = I_{01} B_1 I_{12} B_2 \dots I_{k,k+1} \quad (3.2)$$

on remarque que toutes les entrées des matrices sont connues, sauf celles de  $B_j$  et  $B_l$ . Une expansion des matrices définies numériquement pour les polarisations  $p$  et  $s$  donne deux équations de la forme

$$S_p = \frac{1}{\sqrt{X_j X_l}} T_p \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & X_j \end{pmatrix} U_p \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & X_l \end{pmatrix} V_p, \quad (3.3)$$

$$S_s = \frac{1}{\sqrt{X_j X_l}} T_s \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & X_j \end{pmatrix} U_s \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & X_l \end{pmatrix} V_s, \quad (3.4)$$

$$\text{où} \quad X_j = \exp(-2i \beta_j) \quad \text{et} \quad X_l = \exp(-2i \beta_l). \quad (3.5)$$

Les matrices  $T$ ,  $U$  et  $V$  sont de dimension  $2 \times 2$  et leurs éléments sont définis comme suit\* :

$$T_p = \begin{pmatrix} t_{11p} & t_{12p} \\ t_{21p} & t_{22p} \end{pmatrix}, \quad U_p = \begin{pmatrix} u_{11p} & u_{12p} \\ u_{21p} & u_{22p} \end{pmatrix}, \quad V_p = \begin{pmatrix} v_{11p} & v_{12p} \\ v_{21p} & v_{22p} \end{pmatrix},$$

---

\* Il y a ici une ambiguïté dans la notation utilisée. Dans la définition des matrices  $I$  (Eq. (I.6)),  $t_{12p}$  est le coefficient de Fresnel de transmission de la polarisation  $p$  de l'interface entre les milieux 1 et 2, alors que ce symbole représente ici l'élément (1,2) de la matrice  $T_p$ . Il en est de même pour  $t_{12s}$ .

$$T_s = \begin{pmatrix} t_{11s} & t_{12s} \\ t_{21s} & t_{22s} \end{pmatrix}, \quad U_s = \begin{pmatrix} u_{11s} & u_{12s} \\ u_{21s} & u_{22s} \end{pmatrix}, \quad V_s = \begin{pmatrix} v_{11s} & v_{12s} \\ v_{21s} & v_{22s} \end{pmatrix}.$$

Dans ces équations, les paramètres  $X_j$  et  $X_l$  peuvent être considérés comme les inconnues du système et on peut solutionner les équations ellipsométriques pour ces deux variables. Les épaisseurs sont ensuite déduites des solutions  $X_j$  et  $X_l$  à l'aide d'une inversion semblable à l'Eq. (1.25).

Les rapports ellipsométriques s'expriment uniquement en fonction des deux inconnues  $X_j$  et  $X_l$  :

$$R_p = \frac{X_l t_{21p} u_{12p} v_{21p} + t_{21p} u_{11p} v_{11p} + (X_l t_{22p} u_{22p} v_{21p} + t_{22p} u_{21p} v_{11p}) X_j}{X_l t_{11p} u_{12p} v_{21p} + t_{11p} u_{11p} v_{11p} + (X_l t_{12p} u_{22p} v_{21p} + t_{12p} u_{21p} v_{11p}) X_j} \quad (3.6)$$

$$R_s = \frac{X_l t_{21s} u_{12s} v_{21s} + t_{21s} u_{11s} v_{11s} + (X_l t_{22s} u_{22s} v_{21s} + t_{22s} u_{21s} v_{11s}) X_j}{X_l t_{11s} u_{12s} v_{21s} + t_{11s} u_{11s} v_{11s} + (X_l t_{12s} u_{22s} v_{21s} + t_{12s} u_{21s} v_{11s}) X_j} \quad (3.7)$$

En substituant les Eqs. (3.6) et (3.7) dans l'équation ellipsométrique

$$\rho = \frac{R_p}{R_s}, \quad (3.8)$$

on obtient, après quelques manipulations algébriques, une équation quadratique en  $X_j$  et en  $X_l$ . En supposant que la  $j$ ème couche est transparente, on peut éliminer  $X_j$  des équations comme il a été fait aux chapitres précédents. Donc la forme quadratique

$$a X_j^2 + b X_j + c = 0 \quad (3.9)$$

possède des coefficients  $a$ ,  $b$  et  $c$  quadratiques en  $X_l$ ,

$$a = a_2 X_l^2 + a_1 X_l + a_0, \quad (3.10)$$

$$b = b_2 X_l^2 + b_1 X_l + b_0, \quad (3.11)$$

$$c = c_2 X_l^2 + c_1 X_l + c_0. \quad (3.12)$$

Bosch<sup>28</sup> a développé une méthode numérique pour résoudre l'Eq. (3.9) avec les racines de l'équation quadratique en appliquant la méthode de Reinberg à un système à deux couches. Nous développerons les équations pour obtenir une forme polynomiale.

Dépendamment de la condition d'angle critique,  $X_j$  est de module unité et  $X_l$  doit satisfaire

$$(a a^\dagger - c c^\dagger)^2 - (-b a^\dagger + c b^\dagger)(-a b^\dagger + b c^\dagger) = 0, \quad (3.13)$$

et 
$$X_j = \frac{-b a^\dagger + c b^\dagger}{a a^\dagger - c c^\dagger} \quad \text{lorsque} \quad \varphi < (\varphi_c)_j, \quad (3.14)$$

ou  $X_j$  est réel et  $X_l$  doit satisfaire

$$(-c a^\dagger + a c^\dagger)^2 + (b a^\dagger - a b^\dagger)(-c b^\dagger + b c^\dagger) = 0, \quad (3.15)$$

et 
$$X_j = \frac{-c a^\dagger + a c^\dagger}{b a^\dagger - a b^\dagger}. \quad \text{lorsque} \quad \varphi > (\varphi_c)_j. \quad (3.16)$$

Dans les deux cas (Eqs. (3.13) et (3.15)), nous avons à solutionner en fonction de  $X_l$  seulement l'équation

$$P(X_l) = 0, \quad (3.17)$$

qui consiste en une somme de produits des puissances de  $X_l$  et  $X_l^\dagger$ ,

$$P(X_l) = \sum_{j=0}^4 \sum_{k=0}^4 A_{j,k} X_l^j (X_l^\dagger)^k. \quad (3.18)$$

La fonction  $P(X_l)$  ne peut être considérée comme une fonction analytique de la variable complexe  $X_l = x + i y$ . En effet, en décomposant  $P(X_l)$  en ses parties réelles et imaginaires,

$$P(X_l) = u(x, y) + i v(x, y), \quad (3.19)$$

il faudrait que les conditions de Cauchy-Riemann soient satisfaites pour que  $P(X_l)$  soit analytique, c'est-à-dire que

$$\frac{\partial}{\partial x} u = \frac{\partial}{\partial y} v, \quad \frac{\partial}{\partial y} u = -\frac{\partial}{\partial x} v. \quad (3.20)$$

Or puisque la fonction  $P(X_l)$  est toujours réelle, on a  $u(x, y) \neq 0$  et  $v(x, y) = 0$  et les conditions de l'Eq. (3.20) ne sont pas satisfaites. Par conséquent, nous devons considérer l'Eq. (3.17) comme étant une fonction réelle de deux paramètres réels :

$$P(x, y) = 0. \quad (3.21)$$

Ces deux paramètres sont des fonctions de l'épaisseur de la couche, qui est la véritable inconnue du système,

$$x + i y = \exp \left[ -4 \pi i n_l \cos[\varphi_l] \frac{d_l}{\lambda} \right]. \quad (3.22)$$

Puisque l'inconnue se trouve dans le terme exponentiel, nous n'avons pas de forme polynomiale à résoudre.

Jusqu'ici, aucune restriction n'a été faite sur la valeur de l'indice de réfraction  $n_l$ . La fonction  $P(X_l)$  n'est pas analytique dans le cas général où  $n_l$  est complexe. Cependant, dans le cas particulier où l'indice est réel, on introduit la restriction

$$X_l^\dagger = \frac{1}{X_l} \quad (3.23a)$$

ou 
$$X_l^\dagger = X_l. \quad (3.23b)$$

Dans les deux cas la substitution de l'Eq. (3.23a ou b) dans l'Eq. (3.18) donne un 8-nôme en  $X_l$ , une fonction qui cette fois dépend de façon analytique d'une seule variable complexe  $X_l$ . Les racines de ce polynôme étant de module unité, nous pouvons calculer l'épaisseur  $d_l$  de la couche à l'aide de l'Eq. (1.25). La façon explicite de calculer les coefficients du polynôme est donnée dans l'Appendice C. De plus, il est montré dans cet Appendice C qu'une transformation appropriée du 8-nôme complexe donne un 8-nôme réel à solutionner pour ses racines réelles.

Cette transformation permet de simplifier et d'accélérer la procédure numérique de calcul des racines du polynôme.

Pour résumer, la méthode de solution pour deux épaisseurs d'un système de multicouches consiste à :

1. Calculer les coefficients du 8-nôme (Appendice C).
2. Trouver les racines du 8-nôme ayant un module unité.
3. Pour chaque racine de module unité :
  - 3.1 Calculer l'épaisseur  $d_l$ , Eq. (1.25).
  - 3.2 Calculer  $a$ ,  $b$  et  $c$ , Eqs. (3.10-3.12).
  - 3.3 Calculer  $X_j$ , Eq. (3.14) ou (3.16).
  - 3.4 Calculer  $d_j$ , Eq. (1.25).

**Cas particulier : les couches minces.** Lors du calcul de l'indice de réfraction et de l'épaisseur d'une couche mince, la difficulté suivante se présente : lorsque l'épaisseur est nulle, son indice de réfraction est indéterminé. En fait, s'il n'y a pas de couche du tout, on ne peut lui attribuer un indice de réfraction particulier. Mathématiquement, nous avons un cas dégénéré où toutes les valeurs d'indice sont solutions du système. Cette dégénérescence à  $d = 0$  se reflète lorsque l'on a à résoudre les équations pour les couches minces, avec comme conséquence que les solutions deviennent plus sensibles aux erreurs expérimentales.

Par ailleurs il n'y a pas de dégénérescence lorsque  $d_j = d_l = 0$  dans le cas où les deux épaisseurs ont des indices de couches connus et fixés. Pour la méthode

polynomiale, ce cas n'a rien de singulier et se résout comme pour toute autre épaisseur non nulle.

Pour les faibles épaisseurs, il est possible, avec un développement du premier ordre, de linéariser les équations à résoudre. Au premier ordre en  $d_1$  et  $d_2$ , les deux épaisseurs inconnues du système, l'équation ellipsométrique devient :

$$\rho = \rho_0 + \delta_1 d_1 + \delta_2 d_2, \quad (3.24)$$

$$\delta_1 = \frac{\partial}{\partial d_1} \rho, \quad \delta_2 = \frac{\partial}{\partial d_2} \rho, \quad (3.25)$$

où  $\rho_0$  et les dérivées partielles sont évaluées à  $d_1 = d_2 = 0$ . Avec une mesure de  $\rho$ , il faut résoudre l'Eq. (3.24) pour  $d_1$  et  $d_2$ . En prenant les parties réelles et imaginaires de l'Eq. (3.24) on forme le système linéaire suivant :

$$\begin{pmatrix} \text{Re}[\delta_1] & \text{Re}[\delta_2] \\ \text{Im}[\delta_1] & \text{Im}[\delta_2] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Re}[\rho] - \rho_0 \\ \text{Im}[\rho] - \rho_0 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Dans le cas le plus général, le déterminant de la matrice n'est pas nul et il est possible de calculer les solutions pour  $d_1$  et  $d_2$ ,

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = \frac{\begin{pmatrix} \text{Im}[\delta_2] & -\text{Re}[\delta_2] \\ -\text{Im}[\delta_1] & \text{Re}[\delta_1] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{Re}[\rho] - \text{Re}[\rho_0] \\ \text{Im}[\rho] - \text{Im}[\rho_0] \end{pmatrix}}{-\text{Im}(\delta_1)\text{Re}(\delta_2) + \text{Im}(\delta_2)\text{Re}(\delta_1)}. \quad (3.27)$$

Dans le cas particulier où le déterminant est nul, nous avons que

$$\operatorname{Re}(\delta_1) \operatorname{Im}(\delta_2) - \operatorname{Im}(\delta_1) \operatorname{Re}(\delta_2) = 0, \quad (3.28)$$

ou encore,

$$\frac{\operatorname{Im}(\delta_1)}{\operatorname{Re}(\delta_1)} = \frac{\operatorname{Im}(\delta_2)}{\operatorname{Re}(\delta_2)}. \quad (3.29)$$

L'Eq. (3.29) signifie que la variation de  $\rho$  dans le plan complexe se fait dans la même direction pour une variation de  $d_1$  que pour une variation de  $d_2$ . Conséquemment, une mesure de  $\rho$  sur deux faibles épaisseurs ne permet pas de discriminer la part de chacune des épaisseurs dans la mesure. La seule information donnée par la mesure est la combinaison linéaire suivante de  $d_1$  et  $d_2$  :

$$\rho - \rho_0 = \delta_2 d_2 + \delta_1 d_1. \quad (3.30)$$

Pour trouver les deux épaisseurs, on aura donc besoin d'une autre mesure linéairement indépendante de celle-ci.

Ce cas particulier, où le déterminant est nul, se produit pour une classe importante de systèmes, les systèmes à deux couches sur un substrat non absorbant, pour lesquels les dérivées  $\delta_1$  et  $\delta_2$  sont toutes deux imaginaires.

**Tests numériques et propagation d'erreur.** La procédure polynomiale décrite ci-haut a été testée sur un système à deux couches composé d'un substrat de silicium ( $n_3 = 3,88 - 0,018i$ ) couvert d'oxyde de silicium ( $n_2 = 1,46$ ) et de nitrure de silicium ( $n_1 = 2,00$ ). Le milieu ambiant est l'air ( $n_0 = 1$ ). L'angle d'incidence est de  $70^\circ$  et la longueur d'onde de  $632,8 \text{ nm}$ .



Premièrement, des valeurs de  $\Psi$  et  $\Delta$  ont été générées aléatoirement selon leurs plages respectives de  $0-90^\circ$  et  $0-360^\circ$ . Les systèmes résolus avec ces valeurs ont soit aucune, soit deux solutions. Les croix sur la Figure 12 délimitent le domaine des angles  $\Psi$  et  $\Delta$  donnant deux solutions. Ce domaine est le même que si des valeurs de  $\Psi$  et  $\Delta$  avaient été calculées à partir de valeurs aléatoires des épaisseurs  $d_1$  et  $d_2$ . A partir des solutions  $d_1$  et  $d_2$  trouvées, les angles  $\Psi$  et  $\Delta$  furent recalculés et comparés aux valeurs données au départ. Aucun système n'a montré une erreur d'inversion de plus de  $10^{-4}$  degré.

Deuxièmement, les valeurs des épaisseurs ont été fixées à  $d_1 = 122$  nm et  $d_2 = 104$  nm. Les solutions ont été calculées à plusieurs angles d'incidence pour voir si l'on pouvait discriminer la solution réelle avec une seconde mesure. Les résultats sont montrés aux Figures 13 et 14. On peut voir que la solution correspondant au système simulé est stable tandis que la seconde solution varie en fonction de l'angle d'incidence. Cette variation est suffisante pour discriminer le système réel. Pour des angles d'incidence inférieurs à  $8,4^\circ$ , quatre solutions sont obtenues. Dans la Figure 13, les branches supérieures et inférieures de la solution pour  $d_1$  sont connectées par la dépendance périodique des angles ellipsométriques par rapport à l'épaisseur de la couche.

Les courbes des Figures 13 et 14 ont été recalculées en introduisant une erreur aléatoire uniforme de  $\pm 0,1^\circ$  en  $\Psi$  et de  $\pm 0,2^\circ$  en  $\Delta$  aux valeurs calculées. Les résultats sont démontrés à la Figure 15 pour les épaisseurs  $d_1$  et à la Figure 16 pour les épaisseurs  $d_2$ .

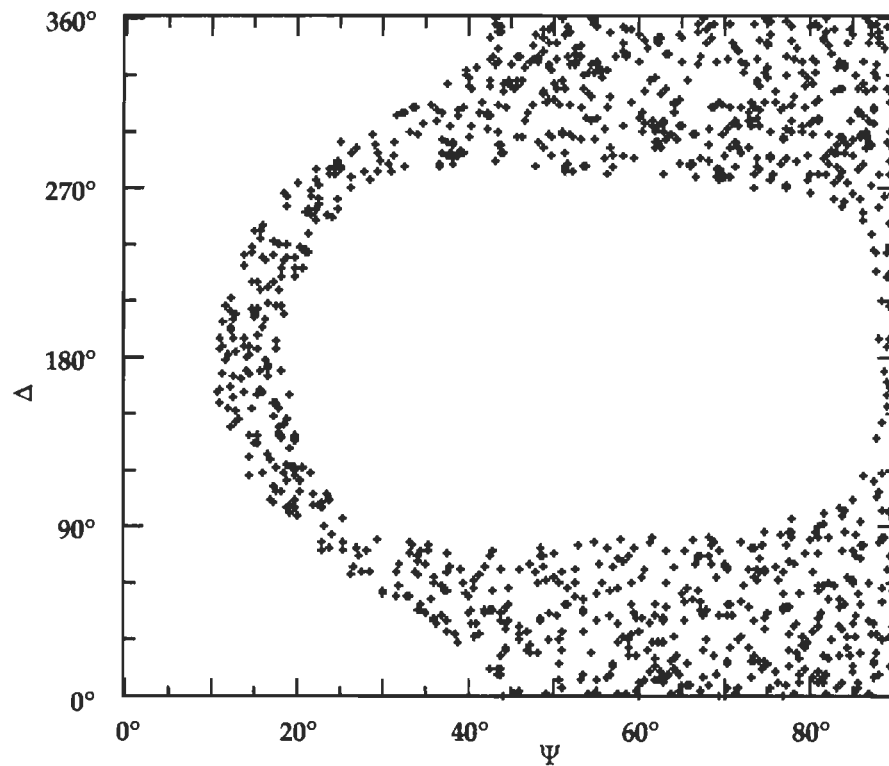


Figure 12. Domaine des valeurs de  $\Psi$  et  $\Delta$  qui possèdent deux solutions (épaisseurs  $d_1$  et  $d_2$ ) pour une mesure ellipsométrique sur un substrat de silicium ( $n_3 = 3,88 - 0,018i$ ) couvert d'oxyde de silicium ( $n_2 = 1,46$ ) et de nitrure de silicium ( $n_1 = 2,00$ ). Le milieu ambiant est l'air ( $n_0 = 1$ ). L'angle d'incidence est de  $70^\circ$  et la longueur d'onde de  $632,8 \text{ nm}$ .

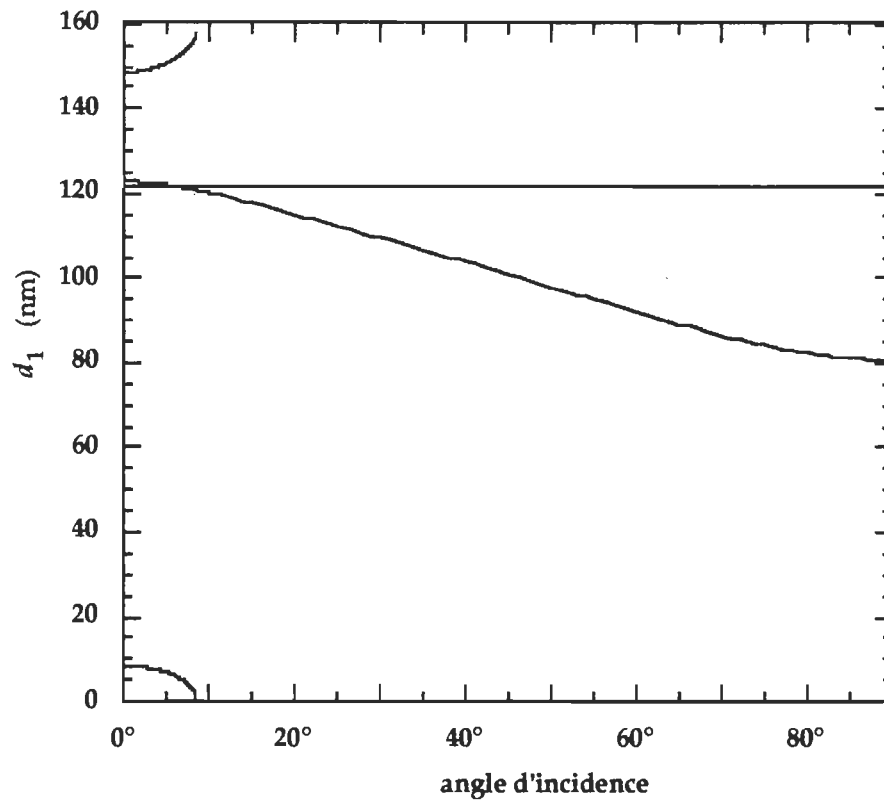


Figure 13. Variation des épaisseurs solutions de la première couche en fonction de l'angle d'incidence. La solution  $d_1 = 122$  nm correspondant au système simulé est stable tandis que l'autre varie. Cette variation permet de discriminer la solution vraie avec une mesure ellipsométrique à deux angles d'incidence.

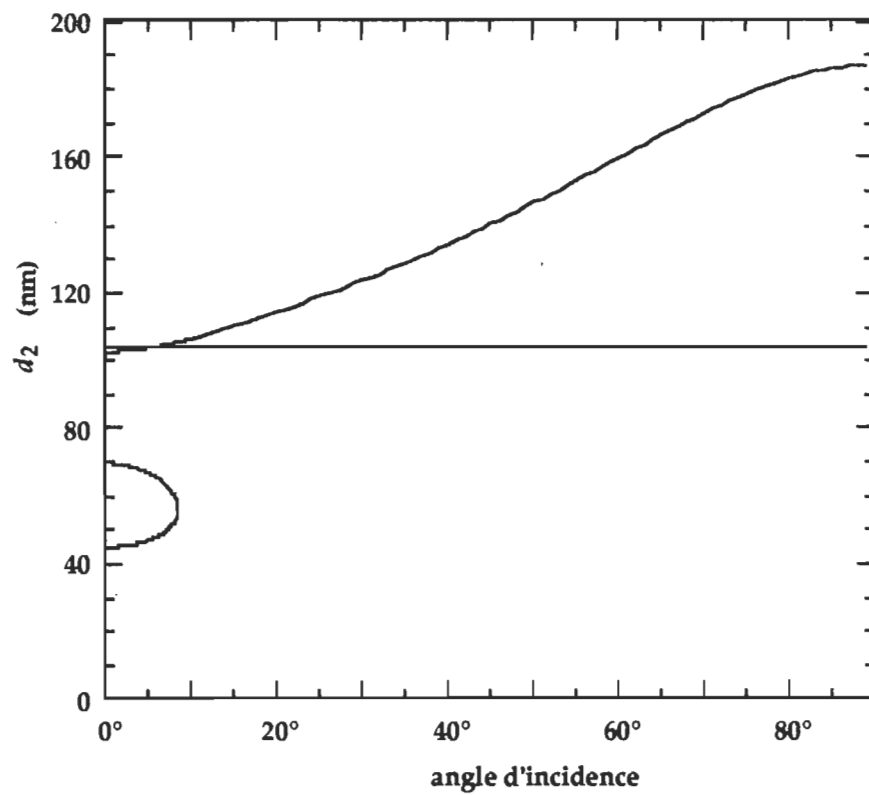


Figure 14. Variation des épaisseurs solutions de la deuxième couche correspondant à la Figure 13.

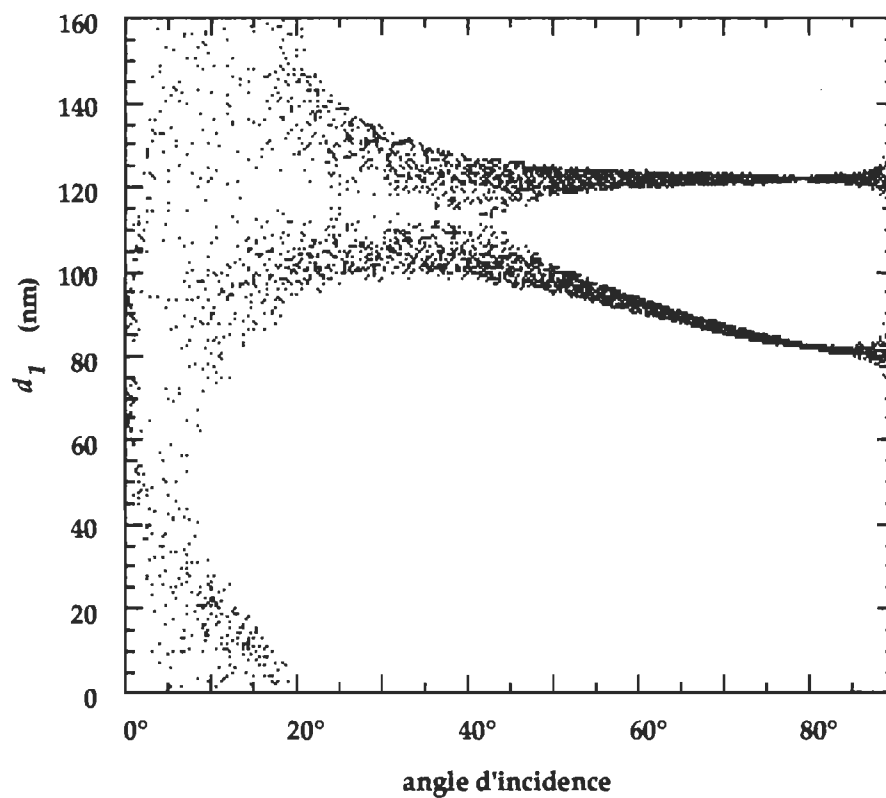


Figure 15. Etalement des épaisseurs  $d_1$  produit par les solutions du polynôme lorsque des erreurs aléatoires sont introduites dans les données ellipsométriques simulées. Les erreurs sont distribuées uniformément entre  $\pm 0,1^\circ$  en  $\Psi$  et  $\pm 0,2^\circ$  en  $\Delta$ .

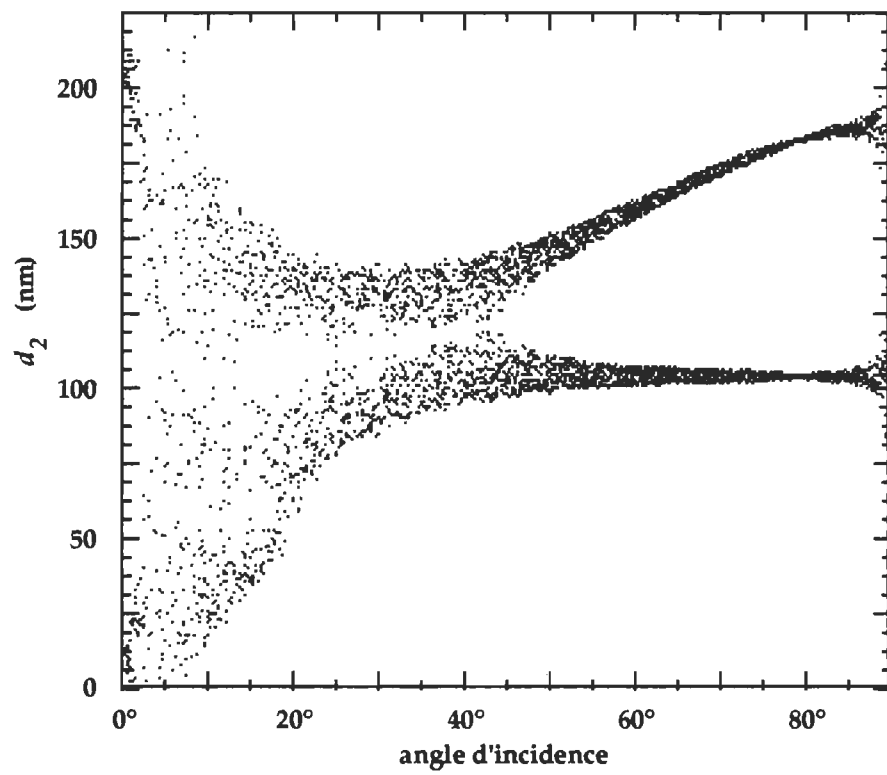


Figure 16. Etalement des épaisseurs  $d_2$  produit par les solutions du polynôme lorsque des erreurs aléatoires sont introduites dans les données ellipsométriques simulées. Les erreurs sont distribuées uniformément entre  $\pm 0,1^\circ$  en  $\Psi$  et  $\pm 0,2^\circ$  en  $\Delta$ .

## CHAPITRE 4

### COUCHES MONOMOLÉCULAIRES À L'INTERFACE AIR-EAU

L'ellipsométrie trouve son application en biophysique dans la mesure des propriétés optiques de couches monomoléculaires (monocouches) à l'interface air-eau. Ces monocouches simulent la membrane cellulaire. L'ordre de grandeur de l'épaisseur de ces monocouches est d'environ 2 nm et moins, c'est-à-dire une valeur beaucoup plus petite que la longueur d'onde de la lumière utilisée pour la mesure (de 400 à 700 nm).

La Figure 17 montre des courbes de contour de la mesure de  $\Psi$  sur une monocouche à l'interface air-eau ( $n_0 = 1$ ;  $n_2 = 1,33$ ). L'indice de la monocouche varie de 1,2 à 1,7 et l'épaisseur de 0 à 2 nm. L'angle d'incidence est de  $60^\circ$  et la longueur d'onde est celle d'un laser He-Ne, 632,8 nm. Le nombre désignant chaque courbe de contour est la différence en millième de degré entre la mesure de  $\Psi$  sur l'eau pure et la mesure avec la monocouche. On y note que l'angle  $\Psi$  varie peu, en deçà de la résolution expérimentale accessible. La droite à  $n_1 = n_2 = 1,33$  correspond évidemment à une variation nulle de la mesure. La sensibilité de la mesure ellipsométrique est faible lorsque l'indice de la couche est proche de l'indice du substrat, la couche étant dans ce cas presque invisible. On ne possède donc pas la définition nécessaire pour la mesure de  $\Psi$  dans le cas des couches minces pour résoudre avec précision l'équation ellipsométrique.

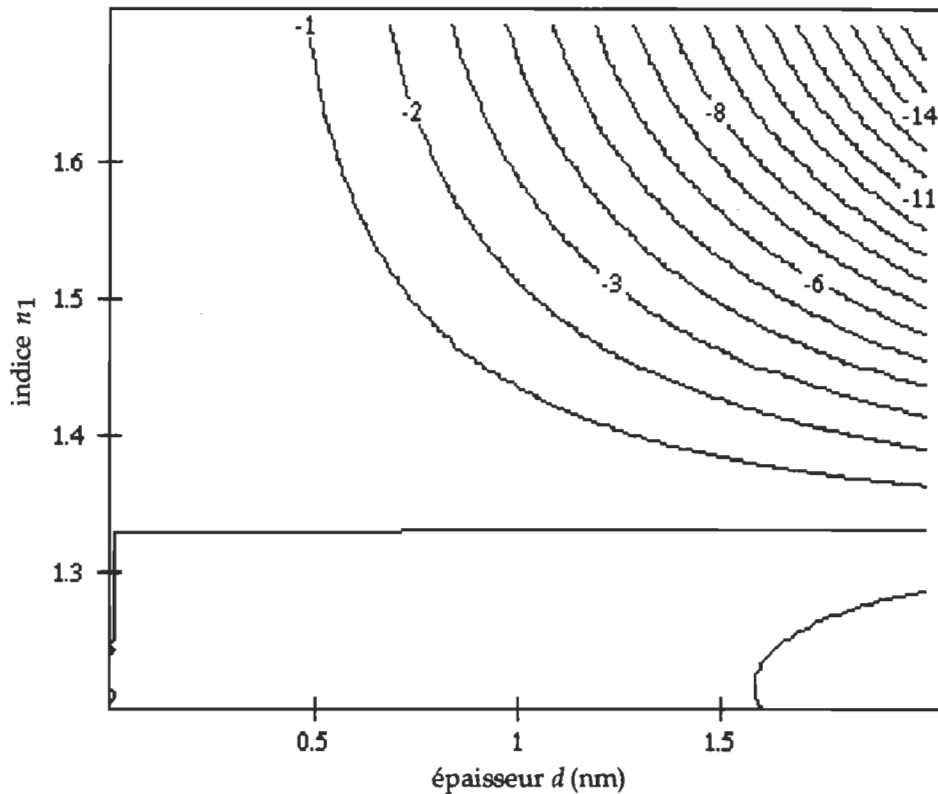


Figure 17. Variation en millièmes de degré de la mesure de  $\Psi$  sur une monocouche à l'interface air-eau, en fonction de son indice et de son épaisseur.

De la même façon que pour la Figure 17, la Figure 18 montre les variations de  $\Delta$  pour une mesure de monocouche à l'interface air-eau. La mesure est ici beaucoup plus sensible à la présence de la monocouche puisque l'intervalle d'étalement des épaisseurs est de 0 à 0,5 nm sur la Figure 18 et les courbes de contour y sont espacées de 50 millièmes de degré.

En pratique, l'information expérimentale ne vient donc que du paramètre  $\Delta$  de la mesure. Puisque l'on perd de l'information ( sur  $\Psi$ ), on ne peut plus résoudre à la



fois l'indice de réfraction et l'épaisseur d'une monocouche avec une seule mesure de  $\Delta$ .

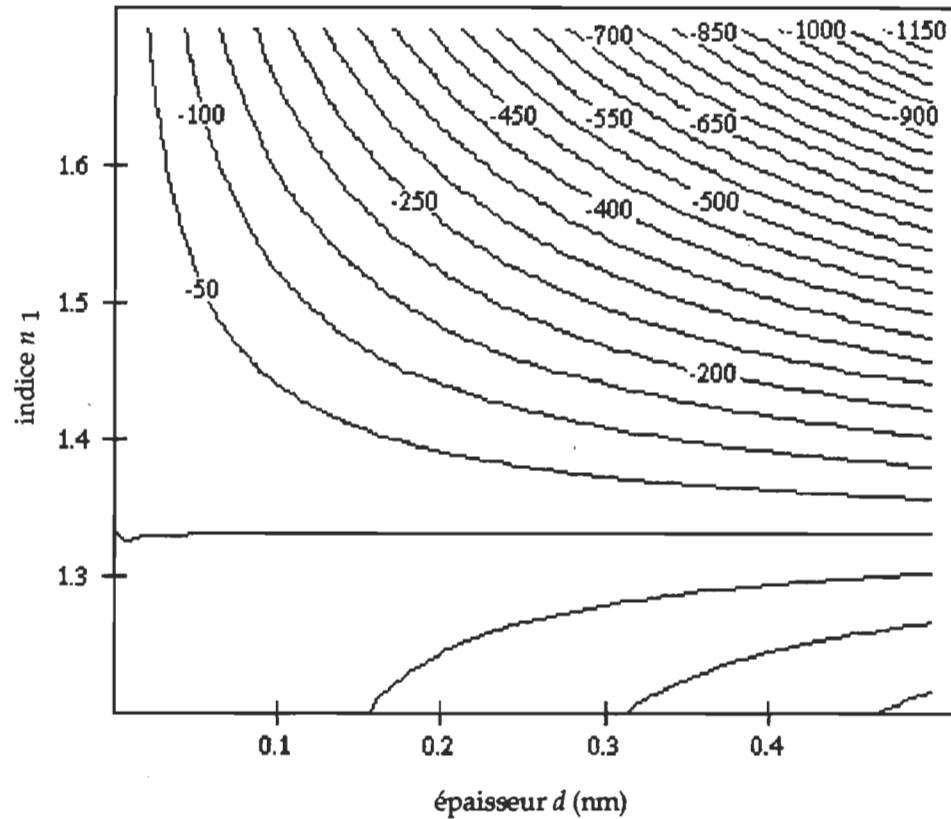


Figure 18. Variation en millièmes de degré de la mesure de  $\Delta$  sur une monocouche à l'interface air-eau, en fonction de son indice et de son épaisseur.

**Équation au premier ordre.** Dans le but de montrer clairement les implications de la mesure sur des couches minces et de l'inversion des équations ellipsométriques, nous considérerons le développement de l'Eq. (1.1) au premier ordre en  $d/\lambda$ . Ce développement nous donne, en supposant que  $n_0$ ,  $n_1$  et  $n_2$  soient réels, une équation beaucoup plus simple reliant  $\Delta$  aux paramètres de la couche. On obtient

l'équation au premier ordre en faisant les hypothèses suivantes, sachant que  $\Delta$  et  $\beta_1$  sont petits lorsque  $d/\lambda$  est petit :

$$\Delta \approx \tan(\Delta) = \text{Im}(\rho) / \text{Re}(\rho),$$

$$\exp(-2i\beta_1) \approx 1 - 2i\beta_1,$$

$$\beta_1^n \approx 0, \quad n \geq 2.$$

En utilisant l'Eq. (1.1) pour  $\rho$ , on obtient :

$$\Delta = -4 \frac{\pi (n_2^2 - n_1^2)(n_1^2 - n_0^2) d n_2^2 n_0 \sin(\varphi) \tan(\varphi)}{(n_2^2 - n_0^2)(n_2^2 - n_0^2 [\tan(\varphi)]^2) n_1^2 \lambda}. \quad (4.1)$$

Donc la seule quantité mesurée expérimentalement, reliant l'indice de réfraction et l'épaisseur de la couche, est le produit

$$I = \frac{(n_2^2 - n_1^2)(n_1^2 - n_0^2) d}{n_1^2}, \quad (4.2)$$

que l'on obtient en mesurant

$$I = -\frac{1}{4} \frac{(n_2^2 - n_0^2)(n_2^2 - n_0^2 [\tan(\varphi)]^2) \lambda \Delta}{\pi n_2^2 n_0 \sin(\varphi) \tan(\varphi)}. \quad (4.3)$$

Pour trouver  $n_1$  et  $d$ , on a besoin de deux mesures indépendantes de  $I$ . Deux paramètres peuvent être changés pour obtenir une seconde mesure : l'angle

d'incidence  $\varphi$  et la longueur d'onde  $\lambda$ . Selon l'Eq. (4.2),  $I$  ne dépend pas de l'angle d'incidence à laquelle la mesure est effectuée. Deux mesures à deux angles d'incidence différents ne sont donc pas indépendantes, car elles produisent la même valeur de  $I$ . Il en est de même pour deux mesures à deux longueurs d'onde différentes si on néglige la dispersion des milieux, c'est-à-dire la variation de l'indice de réfraction avec la longueur d'onde.

**Solution avec un substrat dispersif.** Supposons maintenant que le substrat soit dispersif. En effectuant deux mesures  $I_1$  et  $I_2$  à deux longueurs d'onde différentes où l'indice du substrat est respectivement  $n_{21}$  et  $n_{22}$ , nous obtenons deux mesures indépendantes nous donnant le système d'équations suivant, lequel est à résoudre :

$$I_1 = \frac{(n_{21}^2 - n_1^2)(n_1^2 - 1)d}{n_1^2}, \quad (4.4)$$

$$I_2 = \frac{(n_{22}^2 - n_1^2)(n_1^2 - 1)d}{n_1^2}. \quad (4.5)$$

La solution de ce système pour l'indice  $n_1$  et l'épaisseur  $d$  est

$$n_1^2 = \frac{n_{21}^2 I_2 - n_{22}^2 I_1}{I_2 - I_1}, \quad (4.6)$$

$$d = \frac{(I_2 - I_1)(-n_{21}^2 I_2 + n_{22}^2 I_1)}{(n_{22}^2 - n_{21}^2)(I_2 - n_{21}^2 I_2 - I_1 + n_{22}^2 I_1)}. \quad (4.7)$$

On remarque que la solution dépend de la différence entre les mesures, ce qui augmente l'erreur relative due à la mesure de  $\Delta$ . La solution nécessite une mesure précise et une sensibilité accrue de  $\Delta$  par rapport aux changements d'épaisseur et d'indice de la couche.

**Mesure près de l'angle de Brewster.** Une façon d'augmenter la sensibilité de la mesure de  $\Delta$  est de travailler près de l'angle de Brewster. En effet, on retrouve au dénominateur de l'expression de  $\Delta$  à l'Eq. (4.1) le terme suivant,

$$n_2^2 - n_0^2 (\tan[\varphi])^2, \quad (4.8)$$

et puisque la valeur de l'angle de Brewster est

$$\tan(\varphi_B) = \frac{n_2}{n_0}, \quad (4.9)$$

alors l'Eq. (4.8) peut s'écrire

$$n_0^2 \left( [\tan\{\varphi_B\}]^2 - [\tan\{\varphi\}]^2 \right). \quad (4.10)$$

Cette dernière expression, qui diminue lorsque l'on s'approche de l'angle de Brewster, a pour effet d'augmenter la sensibilité de  $\Delta$  lorsqu'une mesure est effectuée aux environs de cet angle.

Il y a toutefois des effets adverses à considérer lorsqu'on désire travailler à un angle près de l'angle de Brewster. Premièrement, pour calculer  $I$  et solutionner les équations, nous avons besoin d'une mesure précise de l'angle d'incidence et de

l'angle de Brewster afin de calculer les Eqs. (4.10) et (4.3). Puisqu'il s'agit d'une différence de mesures, l'erreur relative sur la différence en est augmentée. Or, connaître la valeur précise de l'angle d'incidence d'un ellipsomètre est une mesure difficile et peut facilement devenir la source d'erreur la plus importante aux environs de l'angle de Brewster. De plus, puisque le substrat est dispersif, l'angle de Brewster est différent pour chaque longueur d'onde de prise de mesure.

Deuxièmement, près de l'angle de Brewster,  $\Delta$  augmente et l'approximation de l'Eq. (4.1) est moins précise. En effet, cette approximation suppose que  $\Delta$  est petit et que  $\tan(\Delta) \approx \Delta$ . Pour de grands  $\Delta$  (supérieurs à  $10^\circ$ ), il est préférable d'utiliser  $\tan(\Delta)$  au lieu de  $\Delta$  dans l'Eq. (4.1). De plus, la contribution des ordres supérieurs en  $d/\lambda$  devient suffisamment importante pour entraîner des erreurs non négligeables dans la solution du premier ordre.

Ces considérations rencontrées au premier ordre des équations sont aussi valables lorsque les équations complètes sont résolues. Considérons maintenant un exemple numérique pour évaluer l'influence des erreurs expérimentales et les erreurs de modèle. Dans ce qui suit, l'approximation au premier ordre n'est plus utilisée. Ce sont les équations ellipsométriques sans approximation qui sont résolues numériquement.

**Exemple numérique.** Prenons par exemple une couche d'indice  $n_1 = 1,5$  et d'épaisseur  $d = 0,8$  nm. L'angle d'incidence est de  $\varphi = 50^\circ$ . Aux longueurs d'onde de 457 et 633 nm, l'indice de réfraction de l'eau est  $n_{457} = 1,3384$  et  $n_{633} = 1,3314$ . On simule les deux  $\Delta$  qui devraient être mesurés à ces deux longueurs d'onde. Sur

la Figure 19, chaque courbe représente les couples  $(n_1, d)$  qui correspondent à la mesure, une par longueur d'onde. Leur intersection est la solution et correspond bien à  $n_1 = 1,5$  et  $d = 0,8$  nm. Toutefois à cette intersection les courbes ont des pentes très semblables et la solution du système est par conséquent sensible aux erreurs expérimentales.

Considérons une erreur de  $\pm 0,005^\circ$  dans la mesure de  $\Delta$ . Les solutions donnent alors  $n_1 = 1,50 \pm 0,03$  et  $d = 0,80 \pm 0,15$  nm. C'est une marge d'erreur qui serait acceptable compte tenu de la faible épaisseur des couches monomoléculaires. De plus, ce ne sont pas toutes les valeurs de  $n_1$  et  $d$  dans la plage d'erreurs qui sont valides comme solution. Par exemple, un indice de 1,53 et une épaisseur de 0,85 nm sont incompatibles avec les deux mesures car ce point ne se situe pas sur les courbes. En fait, si on connaît par une mesure indépendante une des deux valeurs  $n_1$  ou  $d$ , la mesure ellipsométrique permet de déterminer l'autre.

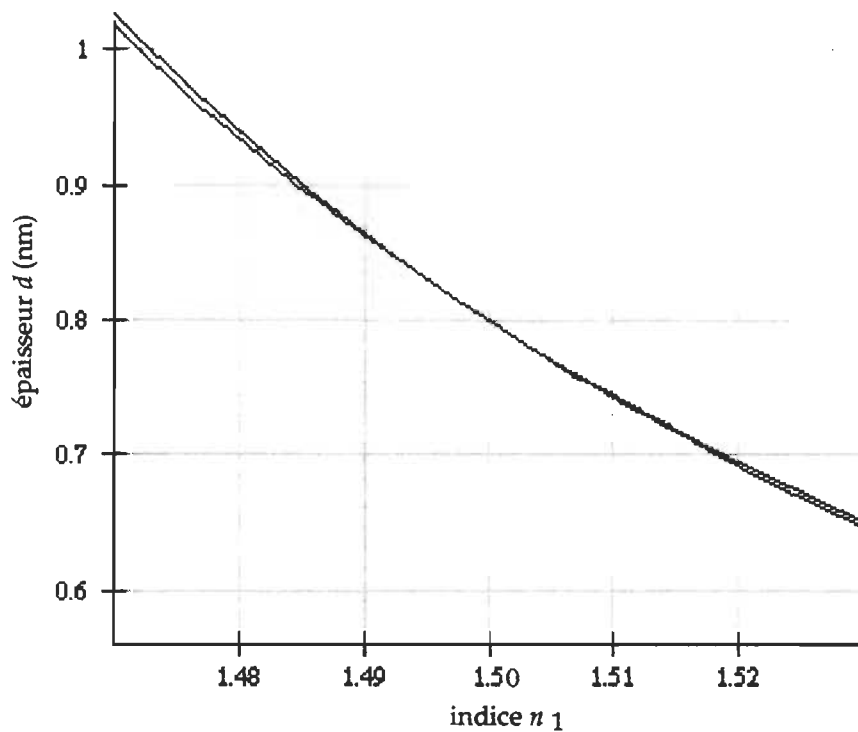


Figure 19. Les mesures de  $\Delta$  à deux longueurs d'onde permettent de tracer deux courbes (équations) dont l'intersection est la solution du système.

**Erreurs de modèle.** Cette façon de solutionner les équations ellipsométriques pour les couches minces, en considérant la dispersion du substrat, utilise une approximation qu'il est difficile d'appliquer aux systèmes physiques réels. Alors que la dispersion du substrat n'est pas considérée négligeable pour permettre d'obtenir des mesures indépendantes, la couche est considérée non dispersive et son indice de réfraction est tenu pour le même pour les deux mesures. Ces hypothèses sont contradictoires, car on doit normalement s'attendre à ce que la monocouche démontre une dispersion dans le visible qui ne soit pas négligeable par rapport à celle de l'eau.

En solutionnant les données expérimentales simulées de la couche dispersive dans l'approximation où la couche n'est pas dispersive, on commet une erreur de modèle. Ceci veut dire que les résultats sont faussés étant donné que le modèle du système utilisé pour interpréter les mesures expérimentales est inadéquat et ne correspond pas au système réel.

Une autre approximation qui peut engendrer une erreur de modèle est de considérer l'indice de la couche comme isotrope alors que la couche peut démontrer des propriétés uniaxiales.

Un milieu uniaxial possède deux indices de réfraction distincts dans les deux directions perpendiculaires  $s$  et  $p$ . Au premier ordre en  $d/\lambda$ , le  $\Delta$  produit par la couche est

$$\Delta = -4 \frac{\pi \left[ (-n_0^2 + n_p^2) n_2^2 + (n_0^2 - n_s^2) n_p^2 \right] d n_2^2 n_0 \sin(\varphi) \tan(\varphi)}{(n_2^2 - n_0^2) (n_2^2 - n_0^2 [\tan(\varphi)]^2) n_p^2 \lambda} \quad (4.11)$$

Lorsque la couche est isotrope,  $n_s = n_p = n_1$  et alors l'Eq. (4.11) est identique à l'Eq. (4.1). Antippa *et al.*<sup>29</sup> ont développé une méthode analytique (au premier ordre) de solution des équations ellipsométriques pour les couches minces uniaxiales pour les trois inconnues  $n_s$ ,  $n_p$  et  $d$ . Pour obtenir trois mesures indépendantes à trois longueurs d'onde, ils ont démontré qu'il fallait à la fois tenir compte de la dispersion du substrat et de celle du milieu ambiant. Or à l'interface air-eau, la mesure de la dispersion de l'air peut être une tâche extrêmement délicate à réaliser expérimentalement.



Exemple numérique des erreurs de modèle. Considérons premièrement l'influence de la dispersion de la couche à l'aide d'un exemple numérique. En supposant maintenant que la couche soit dispersive, les mesures seront différentes aux deux longueurs d'onde. Prenons  $n_1 = 1,502$  à 457 nm et  $n_1 = 1,5$  à 633 nm, ce qui correspond à une dispersion trois fois plus faible que celle de l'eau. Comme le montre la Figure 20, l'erreur de modèle est dans ce cas-ci plus importante que l'erreur expérimentale. La solution des données de la couche dispersive par un modèle non dispersif donne en effet  $n_1 = 1,59$  et  $d = 0,46$  nm.

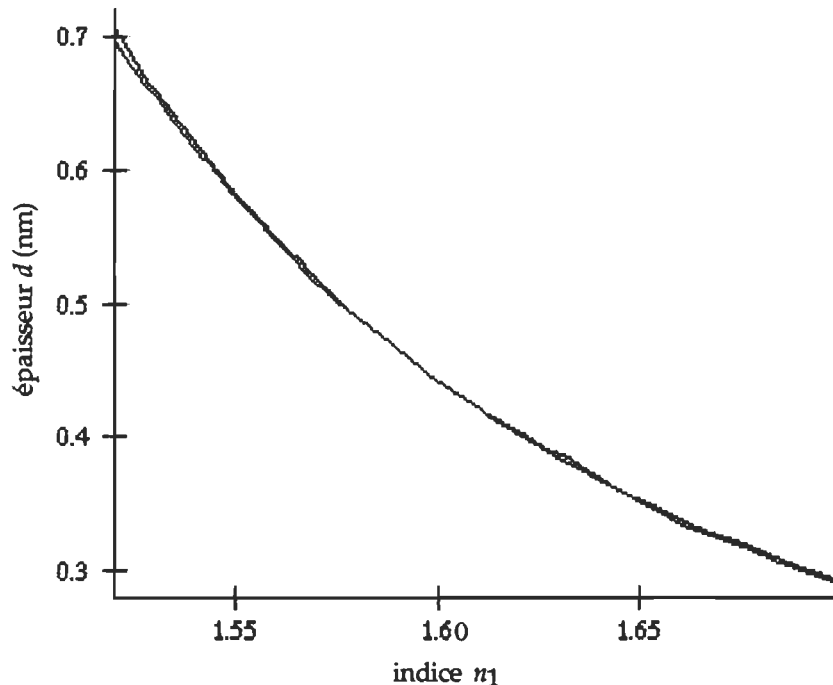


Figure 20. Solution des mesures de  $\Delta$  dans le modèle non dispersif alors que la couche réelle (simulée) est dispersive.

Une erreur en  $\Delta$  de  $\pm 0,005^\circ$  correspond environ à l'épaisseur du trait des courbes de la Figure 20. Avec une telle erreur expérimentale, les solutions du système sont  $n_1 = 1,60 \pm 0,06$  et  $d = 0,46 \pm 0,14$ , ce qui est très loin des véritables paramètres de la

couche. Cet exemple démontre bien que la dispersion de la couche ne peut être négligée dans l'inversion des mesures ellipsométriques.

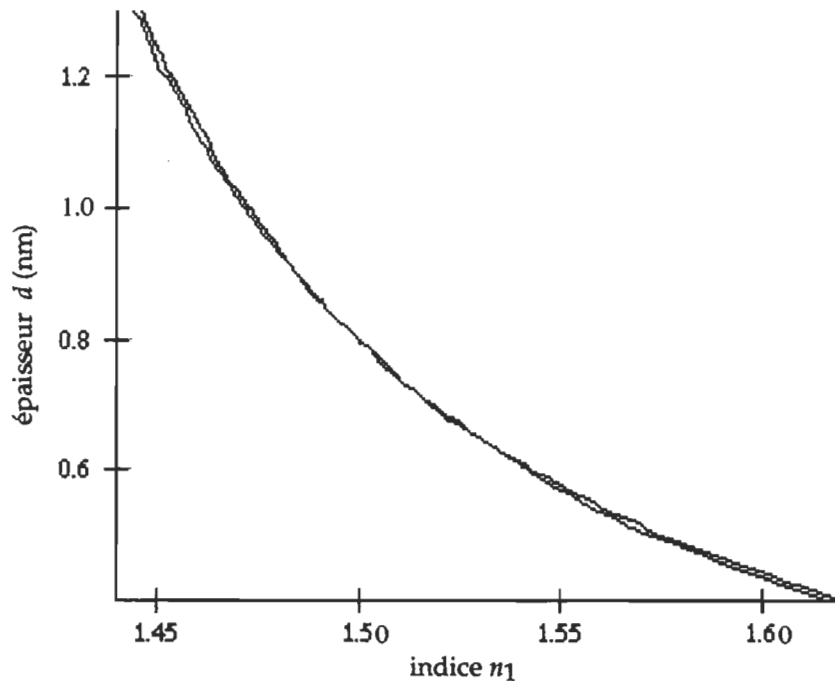


Figure 21. Solution des mesures de  $\Delta$  dans le modèle isotrope alors que la couche réelle (simulée) est uniaxiale.

Supposons maintenant que la couche soit uniaxiale (et non dispersive). Prenons  $n_s = 1,5$  et  $n_p = 1,502$  et résolvons les données ellipsométriques comme si la couche était isotrope. Comme on peut le voir à la Figure 21, la solution est proche des paramètres réels de la couche avec  $n_1 = 1,498$  et  $d = 0,803$  nm. On peut donc se permettre de négliger l'uniaxialité de la couche sans trop introduire d'erreur de modèle. Si cela n'avait pas été le cas, il aurait été difficile d'obtenir des mesures indépendantes pour l'inversion des données ellipsométriques, car au premier

ordre, les mesures ne sont pas indépendantes si on ne tient pas compte de la dispersion du milieu ambiant.

**Modèle de couche dispersive.** Pour ne pas commettre d'erreur de modèle due à la dispersion de la couche, il faut donc considérer que l'indice de réfraction de la couche est dépendant des longueurs d'onde où les mesures sont effectuées. Après une première mesure à  $\lambda_1$ , il y a deux paramètres inconnus de la couche,  $d$  et  $n_1(\lambda_1)$ . Après une seconde mesure, nous avons trois inconnues,  $d$ ,  $n_1(\lambda_1)$  et  $n_1(\lambda_2)$ . Chaque nouvelle mesure amène une nouvelle inconnue et il y a toujours une inconnue de plus qu'il y a de mesures, d'où l'impossibilité d'inverser les mesures sans émettre d'hypothèses supplémentaires dans le modèle de la couche.

Au lieu de décrire la courbe de dispersion par la valeur de l'indice à chaque longueur d'onde, faisons l'hypothèse que l'indice suit une loi de dispersion bien définie,  $n_1 = n_1(\lambda)$ .

Dispersion d'un milieu résonnant.<sup>30</sup> Supposons que chaque électron d'une molécule y soit lié par une force harmonique. Lorsqu'on applique un champ électrique  $E(x,t)$  son équation de mouvement est

$$m[\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0 x] = -q_e E(x,t), \quad (4.12)$$

où  $m$  et  $-q_e$  sont la masse et la charge de l'électron,  $\omega_0$  la fréquence de la force harmonique et  $\gamma$  est une mesure de la force phénoménologique de friction. Alors la contribution de l'électron au moment dipolaire est

$$\mathbf{p} = -q_e \mathbf{x} = \frac{q_e^2}{m} \frac{\mathbf{E}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma}. \quad (4.13)$$

Supposons de plus qu'il y ait : (a)  $N$  molécules par unité de volume; (b)  $Z$  électrons par molécule; (c)  $(M + 1)$  fréquences de liaison plutôt que d'avoir une seule fréquence de liaison pour tous les électrons; (d)  $f_j$  électrons par molécule avec une fréquence  $\omega_j$  et une constante de friction  $g_j$ . Alors la constante diélectrique  $\epsilon$  est donnée par

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi q_e^2 N}{m} \left[ \sum_{j=0}^M \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma_j \omega} \right]. \quad (4.14)$$

En exprimant en longueur d'onde on a

$$\epsilon(\lambda) = 1 + \frac{4\pi q_e^2 N}{m c^2} \sum_{j=0}^M \frac{f_j \lambda^2 \lambda_j^2}{-\lambda_j^2 - i \delta_j \lambda \lambda_j^2 + \lambda^2}, \quad (4.15)$$

où  $c$  est la vitesse de la lumière et

$$\omega = \frac{c}{\lambda} \quad \omega_j = \frac{c}{\lambda_j} \quad \delta_j = \frac{\gamma_j}{c}.$$

Dans le spectre visible, et éloigné d'une longueur d'onde de résonance  $\lambda_j$ , une bonne approximation du comportement de l'Eq. (4.15) est donnée par

$$\epsilon(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2}, \quad (4.16)$$

qui représente une loi de dispersion pour le milieu.

Solution au premier ordre pour une couche dispersive. Supposons que la monocouche démontre une loi de dispersion selon l'Eq. (4.16)

$$n_1^2 = A + \frac{B}{\lambda^2}. \quad (4.17)$$

Dans ce cas, nous avons trois paramètres inconnus de la monocouche, soient  $d$ ,  $A$  et  $B$ . Avec trois mesures à trois longueurs d'onde différentes, nous devrions en principe pouvoir déterminer ces paramètres.

Supposons que l'on prenne trois mesures aux longueurs d'onde  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  et  $\lambda_3$ , où le substrat a comme indice  $n_{21}$ ,  $n_{22}$  et  $n_{23}$ . Pour revenir à l'approximation au premier ordre en  $d/\lambda$  (Eq. (4.2)), les trois mesures  $I_1$ ,  $I_2$  et  $I_3$  fournissent comme information

$$I_1 = \frac{(n_{21}^2 \lambda_1^2 - A \lambda_1^2 - B)(-n_0^2 \lambda_1^2 + A \lambda_1^2 + B)d}{(A \lambda_1^2 + B) \lambda_1^2}, \quad (4.18)$$

$$I_2 = \frac{(n_{22}^2 \lambda_2^2 - A \lambda_2^2 - B)(-n_0^2 \lambda_2^2 + A \lambda_2^2 + B)d}{(A \lambda_2^2 + B) \lambda_2^2}, \quad (4.19)$$

$$I_3 = \frac{(n_{23}^2 \lambda_3^2 - A \lambda_3^2 - B)(-n_0^2 \lambda_3^2 + A \lambda_3^2 + B)d}{(A \lambda_3^2 + B) \lambda_3^2}. \quad (4.20)$$

Le système (4.18-20) à trois équations et trois inconnues doit être résolu pour  $d$ ,  $A$  et  $B$ .

Le paramètre  $d$  s'isole facilement dans l'Eq. (4.18),

$$d = \frac{(A \lambda_1^2 + B) I_1 \lambda_1^2}{(n_{21}^2 \lambda_1^2 - A \lambda_1^2 - B)(-n_0^2 \lambda_1^2 + A \lambda_1^2 + B)}, \quad (4.21)$$

pour être remplacé ensuite dans (4.19) et (4.20) et obtenir :

$$I_2 = \frac{(n_{22}^2 \lambda_2^2 - A \lambda_2^2 - B)(-n_0^2 \lambda_2^2 + A \lambda_2^2 + B)(A \lambda_1^2 + B) I_1 \lambda_1^2}{(A \lambda_2^2 + B)(n_{21}^2 \lambda_1^2 - A \lambda_1^2 - B)(-n_0^2 \lambda_1^2 + A \lambda_1^2 + B) \lambda_2^2}, \quad (4.22)$$

$$I_3 = \frac{(n_{23}^2 \lambda_3^2 - A \lambda_3^2 - B)(-n_0^2 \lambda_3^2 + A \lambda_3^2 + B)(A \lambda_1^2 + B) I_1 \lambda_1^2}{(A \lambda_3^2 + B)(n_{21}^2 \lambda_1^2 - A \lambda_1^2 - B)(-n_0^2 \lambda_1^2 + A \lambda_1^2 + B) \lambda_3^2}. \quad (4.23)$$

Exemple et solution graphique. Voyons comment on peut résoudre ces équations avec un exemple numérique. Supposons une mesure aux trois longueurs d'onde suivantes

$$\lambda_1 = 633\text{nm}, \quad \lambda_2 = 547\text{nm}, \quad \lambda_3 = 435\text{nm},$$

où les indices de réfraction sont

$$n_0 = 1, \quad n_{21} = 1,3317, \quad n_{22} = 1,3343, \quad n_{23} = 1,3403.$$

Simulons les mesures  $I_1, I_2$  et  $I_3$  en supposant une couche ayant comme paramètres

$$A = 2,2435, \quad B = 2\,619, \quad d = 0,8 \text{ nm},$$

lesquels sont calculés afin que  $n_1(435) = 1,502$  et  $n_1(633) = 1,500$ . Les mesures simulées sont calculées à partir de l'approximation de l'Eq. (4.2) et non à l'aide de la définition exacte afin de vérifier, de façon conséquente, comment se comporte la solution du système d'équations du premier ordre. Ces mesures sont :

$$I_1 = -0,21177, \quad I_2 = -0,20983, \quad I_3 = -0,20534 \quad (4.24)$$

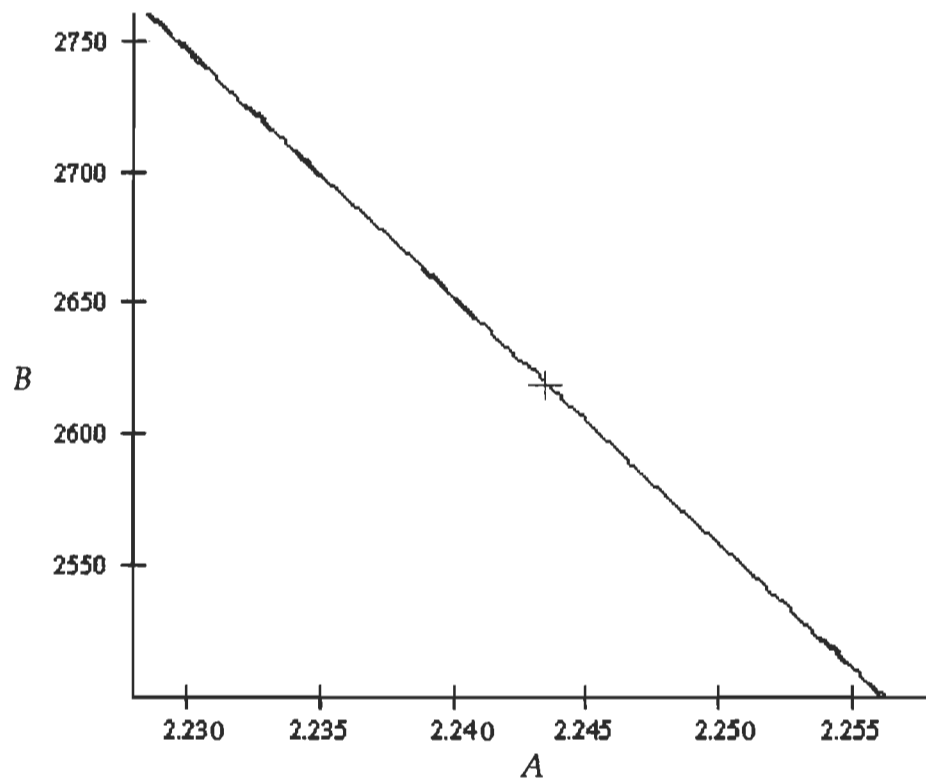


Figure 22. L'intersection des deux courbes (Eqs. (4.22-23)) donne la solution du système simulé. Les courbes sont confondues à toute fin pratique. La croix est située à la véritable solution.

La Figure 22 montre les deux courbes (4.22) et (4.23) dont l'intersection est la solution du système. Le calcul de l'intersection des courbes est indiqué par une croix et correspond effectivement aux paramètres donnés à la couche initialement. Or, à toute fin pratique, les deux courbes sont confondues et le point d'intersection n'a pu être calculé exactement que grâce aux valeurs précises de mesures fournies. Par contre, si les mesures fournies pour l'inversion sont arrondies à cinq chiffres significatifs (i.e. les chiffres montrés à l'Eq. (4.24) et non le calcul exact de la simulation), alors les solutions du système deviennent  $A = 2,3967$ ;  $B = 1\,199,6$  et  $d = 0,580$ , et on obtient  $n_1(435) = 1,5502$  et  $n_1(633) = 1,5491$ . Ces résultats diffèrent largement des données initiales pour une faible variation des valeurs simulées de mesure.

**Conclusion.** Il est difficile, par des mesures ellipsométriques, d'obtenir les équations indépendantes nécessaires pour découpler les différents paramètres d'une monocouche à l'interface air-eau. L'information supplémentaire obtenue par un changement d'angle d'incidence a des effets au second ordre seulement. Un changement de longueur d'onde nous oblige d'autre part à tenir compte de la dispersion de la monocouche pour ne pas commettre d'erreur de modèle trop importante. Le fait de modéliser la dispersion augmente le nombre de paramètres du modèle de la monocouche. La coïncidence des courbes de la Figure 22 semble indiquer que l'information donnée par les différentes mesures n'est pas suffisante pour discriminer ces paramètres supplémentaires.

Ajoutons à cela que l'uniaxialité de la monocouche a été négligée. Dans le cas contraire, les mesures à différentes longueurs d'onde ne sont pas indépendantes au



premier ordre en  $d/\lambda$ , chaque mesure donnant exactement la même information. Le découplage n'est dans ce cas possible qu'en considérant l'effet ténu de la dispersion de l'air<sup>29</sup>. Il faudrait connaître ou mesurer la dispersion d'un air chargé d'humidité à l'interface air-eau avec la précision nécessaire pour résoudre les paramètres intéressants de la monocouche. Un modèle de couche uniaxiale et dispersive se décrit par au moins cinq paramètres (une épaisseur, deux indices de réfraction et deux facteurs de dispersion). Il faudrait donc cinq mesures indépendantes pour résoudre, ce qui, on l'a vu, est virtuellement impossible tant l'information obtenue des mesures ellipsométriques aux faibles épaisseurs est redondante.

Il n'en reste pas moins qu'une mesure ellipsométrique donne effectivement de l'information utile sur une monocouche. La difficulté est simplement que cette information est insuffisante pour caractériser entièrement à elle seule la monocouche. En ce sens, elle peut être utilisée en conjonction avec d'autres méthodes de mesure indépendantes et complémentaires pour découpler les différents paramètres du système sous observation ou pour surveiller l'évolution dynamique de ces paramètres.

## DISCUSSION

**Avantages de la solution polynomiale.** Les méthodes numériques concernant la solution de la couche unique transparente fonctionnent toutes selon un même principe. Une équation de contrainte, que doivent satisfaire  $n_1$  et  $d_1$  est développée sous une forme  $f(n_1, d_1) = 0$ . À partir de valeurs initiales, on varie par itération les deux paramètres jusqu'à ce que la contrainte soit satisfaite, à l'intérieur d'un critère de convergence. Certaines méthodes isolent  $d_1$  de la contrainte qui devient dépendante de  $n_1$  seulement,  $f(n_1) = 0$ . Les Eqs. (1.7), (1.10) et le 5-nôme sont des exemples de telles équations de contrainte. Les équations de contrainte étant toutes des reformulations de l'équation ellipsométrique Eq.(1.1), le travail numérique nécessaire pour les calculer lors de la première itération est quasiment identique. Lors des itérations suivantes, le travail numérique est moindre car plusieurs valeurs, comme par exemple  $\cos(\varphi_2)$ , sont invariantes d'une itération à l'autre. L'efficacité d'une méthode itérative repose donc sur la quantité de paramètres à réévaluer lorsque la valeur de  $n_1$  est changée.

Les contraintes comme les Eqs. (1.7) et (1.10) requièrent à chaque itération le calcul de  $\cos(\varphi_1)$ , des coefficients de Fresnel et de  $a$ ,  $b$  et  $c$ . La méthode de Yorieum<sup>18</sup>, entre autres, demande le calcul de l'intersection de deux cercles dont les rayons et les centres dépendent de  $n_1$ . Tous ces calculs sont relativement complexes et alourdissent les itérations; la méthode polynomiale, quant à elle, ne requiert que l'évaluation d'un 5-nôme dont les coefficients sont invariants d'une itération à l'autre. Bien que le calcul des coefficients demande un peu plus de travail

numérique lors de l'itération initiale, la méthode polynomiale est énormément avantagée en vitesse et en précision par la simplicité des itérations subséquentes.

Les autres méthodes numériques ont besoin qu'on leur fournisse une valeur initiale et un intervalle de recherche; avec la méthode polynomiale, cette information peut en principe être déduite des valeurs des coefficients du polynôme. En outre, toutes les solutions possibles à une mesure donnée sont fournies par les racines du polynôme, ce qui n'est pas possible avec des méthodes numériques dont le comportement est moins bien défini que celui du polynôme.

Tout le travail analytique effectué pour pouvoir exprimer l'Eq. (1.10) sous une forme polynomiale a eu pour effet de réduire l'équation de contrainte à sa forme minimale, c'est-à-dire qu'il est impossible qu'une méthode numérique itérative ait une équation de contrainte plus simple que le 5-nôme, car tout ce qui est constant d'une itération à l'autre a été calculé pour ne laisser que les puissances du paramètre inconnu  $\epsilon$ . Ce qui veut dire que, si jamais une solution plus simple que la méthode polynomiale est élaborée, elle ne sera pas numérique et itérative, mais bien *analytique*. En effet, un degré cinq pour un polynôme est seulement un degré de trop pour que sa solution soit tout-à-fait analytique.

**Considérations analytiques.** Un théorème fondamental d'analyse établit qu'il n'est pas possible d'exprimer la solution générale d'un polynôme de degré supérieur à quatre en termes de radicaux. Il est toutefois possible de factoriser les polynômes dans quelques cas particuliers. Que le 5-nôme de la couche transparente en ellipsométrie puisse éventuellement être factorisé est une question

ouverte. La tâche est considérable : chaque coefficient  $k$  du polynôme dépend de cinq paramètres indépendants qui sont  $\varphi$ ,  $n_2$  (complexe) et  $\rho$  (complexe). L'indice  $n_0$  peut être ignoré comme paramètre indépendant car les équations ne dépendent que des indices de réfraction *relatifs*. Ces paramètres indépendants sont présents à travers les trois complexes  $x$ ,  $y$  et  $z$ , formant six paramètres liés par la relation  $x y = x^\dagger y^\dagger$ . Les coefficients  $k$  sont chacun la somme de plusieurs centaines de produits de diverses puissances de  $x$ ,  $x^\dagger$ ,  $y$ ,  $y^\dagger$ ,  $z$  et  $z^\dagger$  dont les coefficients numériques sont toutefois des entiers. Toutefois, lorsque  $n_2$  est réel, on a pu trouver que  $(y^2 - 1)$  est un facteur commun à chacun des  $k$ . De plus, dans le cas très particulier d'une couche entre deux milieux d'indices identiques, le 5-nôme a pu être factorisé en trois racines de l'équation cubique, solution en ce cas, et deux fausses racines physiquement non valides. Cela laisse un léger espoir que le polynôme puisse se factoriser, mais jamais sans l'aide d'ordinateurs et de logiciels beaucoup plus puissants que ceux utilisés pour développer le polynôme.

Ce qui est vrai pour la couche transparente unique est aussi vrai pour les autres solutions polynomiales démontrées ici. Tout le travail algébrique effectué pour obtenir la forme polynomiale fait en sorte que nous avons maintenant des fonctions à résoudre dont le comportement analytique et le nombre de solutions sont connus, ce qui facilite beaucoup l'analyse des données ellipsométriques.

## APPENDICE A

### DÉVELOPPEMENT DU POLYNÔME DU CINQUIÈME DEGRÉ POUR UNE COUCHE TRANSPARENTE UNIQUE

Le but de cet appendice est de montrer comment on parvient à un 5-nôme à partir de l'Eq. (1.10)

$$(-a b^\dagger + b c^\dagger)^\dagger (-a b^\dagger + b c^\dagger) - (a a^\dagger - c c^\dagger)^2 = 0 \quad (1.10)$$

et de donner explicitement la façon de calculer ses coefficients.

Outre le facteur  $C$  (Eq. (1.23)), qui est commun à  $a$ ,  $b$  et  $c$  et qui se simplifie de l'Eq. (1.10), on s'aperçoit aussi que tout facteur réel commun à  $a$  et  $c$  est aussi un facteur (au carré) de l'Eq. (1.10). Les facteurs réels communs de  $a$  et  $c$  étant  $(t - 1)$  et  $(t + 1)$ , ceci permet donc aussi de simplifier  $(t - 1)^2(t + 1)^2$  de l'Eq. (1.10). Après ces simplifications, l'équation devient

$$(-b_1 a_1^\dagger + c_1 b_1^\dagger)(-b_1 a_1^\dagger + c_1 b_1^\dagger)^\dagger - (a_1 a_1^\dagger - c_1 c_1^\dagger)^2 (t^2 - 1)^2 = 0, \quad (A.1)$$

où les nouveaux coefficients sont

$$a_1 = -(t + x)(t + y)^2(t + x z y), \quad (A.2)$$

$$b_1 = 2(t + y)(t - y)(t^4 + [2x y + x^2 z y + 2x z + 1]t^2 + x^2 z y), \quad (A.3)$$

$$c_1 = -(t - x)(t - y)^2(t - x - z - y). \quad (\text{A.4})$$

Il est important de remarquer ici la symétrie de signes des coefficients:  $a_1(-t) = c_1(t)$ ,  $b_1(-t) = b_1(t)$  et  $c_1(-t) = a_1(t)$ . Cette symétrie entre en cause lorsque l'on considère la condition d'angle critique de la couche. Dans ce cas, en effectuant les mêmes simplifications que précédemment, l'Eq. (1.28) devient

$$(b_1 c_1^\dagger - b_1^\dagger c_1)(a_1 b_1^\dagger - a_1^\dagger b_1) - (a_1 c_1^\dagger - a_1^\dagger c_1)^2(t^2 - 1) = 0. \quad (\text{A.5})$$

Dans l'Eq. (A.5), on a  $t^\dagger = -t$  et donc  $c_1(t)^\dagger$  lorsque  $t$  est imaginaire a la même forme algébrique que  $a_1(t)^\dagger$  lorsque  $t$  est réel, et de même pour  $a_1(t)^\dagger$  qui a la même forme que  $c_1(t)^\dagger$ . Le coefficient  $b_1^\dagger$  quant à lui reste identique que  $t$  soit réel ou imaginaire. En faisant la substitution, on en conclut que les Eqs. (A.1) et (A.5) sont identiques et constituent un seul et même polynôme à résoudre.

On peut maintenant procéder à l'expansion des produits afin d'obtenir la forme polynomiale :

$$a_1 = -t^4 - \alpha_3 t^3 - \alpha_2 t^2 - \alpha_1 t - \alpha_0 \quad (\text{A.6})$$

$$b_1 = 2(t^6 + \alpha_4 t^4 + \alpha_5 t^2 - \alpha_0), \quad (\text{A.7})$$

$$c_1 = -t^4 + \alpha_3 t^3 - \alpha_2 t^2 + \alpha_1 t - \alpha_0. \quad (\text{A.8})$$

Les coefficients  $\alpha$  sont

$$\alpha_0 = x^2 y^3 z,$$

$$\alpha_1 = x y^2 + x y^3 z + 2x^2 y^2 z,$$

$$\alpha_2 = y^2 + 2x y + 2x y^2 z + x^2 y z, \quad (\text{A.9})$$

$$\alpha_3 = x + 2y + x y z,$$

$$\alpha_4 = -y^2 + 2x y + 2x z + x^2 y z + 1,$$

$$\alpha_5 = -2x y^3 - y^2 - x^2 y^3 z - 2x y^2 z + x^2 y z.$$

On obtient alors

$$a_1 a_1^\dagger - c_1 c_1^\dagger = 2(g_6 t^6 + g_4 t^4 + g_2 t^2 + g_0)t \quad (\text{A.10})$$

et

$$\begin{aligned} c_1^\dagger b_1 - a_1 b_1^\dagger = \\ 2(g_6 t^8 + f_7 i t^7 + f_6 t^6 + f_5 i t^5 + f_4 t^4 + f_3 i t^3 + f_2 t^2 + f_1 i t - g_0)t, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

où les coefficients  $g$  sont tous réels :

$$g_0 = \alpha_0 \alpha_1^\dagger + \alpha_1 \alpha_0^\dagger,$$

$$g_2 = \alpha_0 \alpha_3^\dagger + \alpha_1 \alpha_2^\dagger + \alpha_2 \alpha_1^\dagger + \alpha_3 \alpha_0^\dagger, \quad (\text{A.12})$$

$$g_4 = \alpha_1 + \alpha_2 \alpha_3^\dagger + \alpha_3 \alpha_2^\dagger + \alpha_1^\dagger,$$

$$g_6 = \alpha_3 + \alpha_3^\dagger.$$

Les coefficients  $f$  sont aussi tous réels, ce qui fait que les coefficients du polynôme (A.11) sont alternativement réels et imaginaires. Les  $f$  sont définis par

$$\begin{aligned} f_1 &= (-\alpha_0 \alpha_5^\dagger - \alpha_0 \alpha_2^\dagger + \alpha_5 \alpha_0^\dagger + \alpha_2 \alpha_0^\dagger) i, \\ f_2 &= \alpha_1 \alpha_5^\dagger - \alpha_0 \alpha_3^\dagger + \alpha_5 \alpha_1^\dagger - \alpha_3 \alpha_0^\dagger, \\ f_3 &= (-\alpha_0 - \alpha_2 \alpha_5^\dagger - \alpha_0 \alpha_4^\dagger + \alpha_5 \alpha_2^\dagger + \alpha_4 \alpha_0^\dagger + \alpha_0^\dagger) i, \\ f_4 &= \alpha_3 \alpha_5^\dagger + \alpha_1 \alpha_4^\dagger + \alpha_5 \alpha_3^\dagger + \alpha_4 \alpha_1^\dagger, \\ f_5 &= (\alpha_5 - \alpha_0 - \alpha_5^\dagger - \alpha_2 \alpha_4^\dagger + \alpha_4 \alpha_2^\dagger + \alpha_0^\dagger) i, \\ f_6 &= \alpha_1 + \alpha_3 \alpha_4^\dagger + \alpha_4 \alpha_3^\dagger + \alpha_1^\dagger, \\ f_7 &= (\alpha_4 - \alpha_2 - \alpha_4^\dagger + \alpha_2^\dagger) i. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

La mise au carré de l'Eq. (A.10) donne seulement des termes avec des puissances paires de  $t$ ; la multiplication par  $(t^2 - 1)^2$  donne ensuite un 18-nôme pair à coefficients réels. Lorsque l'Eq. (A.11) est multipliée par son conjugué complexe, le



résultat est aussi un 18-nôme pair à coefficients réels, à cause de l'alternance des coefficients réels et imaginaires dans l'Eq. (A.11). Les deux 18-nômes ont un facteur commun  $4t^2$  qui réduit le degré à 16 après simplification. En ayant des polynômes pairs, nous pouvons maintenant substituer une nouvelle variable  $s = t^2$  et réduire le degré à huit. La nouvelle inconnue  $s$  est définie par

$$s = \frac{n_1^2 (\cos[\varphi_1])^2}{n_0^2 (\cos[\varphi])^2} \quad \text{ou} \quad s = (x y + 1) \varepsilon - x y$$

ou encore  $\varepsilon = s (\cos[\varphi])^2 + (\sin[\varphi])^2. \quad (\text{A.14})$

Les deux 8-nômes ayant les mêmes coefficients d'ordre huit et d'ordre zéro, leur différence est un 7-nôme sans terme constant, c'est-à-dire un 6-nôme après simplification de la racine triviale. Le polynôme est maintenant réduit à

$$j_6 s^6 + j_5 s^5 + j_4 s^4 + j_3 s^3 + j_2 s^2 + j_1 s + j_0 = 0, \quad (\text{A.15})$$

où les coefficients  $j$  sont réels et se calculent à partir des  $f$  et  $g$  en utilisant

$$j_0 = f_1^2 + 2g_0^2 - 2f_2 g_0 - 2g_2 g_0,$$

$$j_1 = f_2^2 + 2f_3 f_1 - g_2^2 - g_0^2 - 2f_4 g_0 - 2g_4 g_0 + 4g_2 g_0,$$

$$j_2 = f_3^2 + 2f_4 f_2 + 2f_5 f_1 + 2g_2^2 - 2g_4 g_2 - 2f_6 g_0 - 2g_6 g_0 \\ + 4g_4 g_0 - 2g_2 g_0,$$

$$j_3 = f_4^2 + 2f_5f_3 + 2f_6f_2 + 2f_7f_1 - g_4^2 - g_2^2 - 2g_6g_2 + 4g_4g_2 + 2g_6g_0 - 2g_4g_0, \quad (A.16)$$

$$j_4 = f_5^2 + 2f_6f_4 + 2f_7f_3 + 2f_2g_6 + 2g_4^2 - 2g_6g_4 + 4g_6g_2 - 2g_4g_2 - 2g_6g_0,$$

$$j_5 = f_6^2 + 2f_7f_5 - g_6^2 + 2f_4g_6 - g_4^2 + 4g_6g_4 - 2g_6g_2,$$

$$j_6 = f_7^2 + 2g_6^2 + 2f_6g_6 - 2g_6g_4.$$

On peut vouloir exprimer le polynôme avec la variable physique  $\varepsilon$  au lieu de  $s$ , en utilisant l'Eq. (A.14). Cela donne un polynôme en  $\varepsilon$  ayant comme terme constant

$$j_6x^6y^6 - j_5x^5y^5 + j_4x^4y^4 - j_3x^3y^3 + j_2x^2y^2 - j_1xy + j_0, \quad (A.17)$$

qui est l'Eq. (A.15) avec  $s = -xy$  (par la définition de  $x$  et  $y$ , leur produit  $xy = \tan^2(\varphi)$  est réel). On peut prouver analytiquement que ce terme est nul. La preuve demande d'exprimer les coefficients  $j$  directement en termes des  $x$ ,  $y$  et  $z$  (ensembles de substitutions A.9, A.12, A.13 et A.16) et de les reporter dans l'Eq. (A.17). Cette opération algébrique donne une expression de plus de 2 000 termes, produits de diverses puissances de  $x$ ,  $x^\dagger$ ,  $y$ ,  $y^\dagger$ ,  $z$  et  $z^\dagger$ , et qui se simplifient finalement à zéro. Puisque le terme constant est nul, la solution triviale est retranchée et nous obtenons finalement le 5-nôme pour la constante diélectrique relative  $\varepsilon$  :

$$k_5 \varepsilon^5 + k_4 \varepsilon^4 + k_3 \varepsilon^3 + k_2 \varepsilon^2 + k_1 \varepsilon + k_0 = 0, \quad (\text{A.18})$$

avec ses coefficients qui sont

$$\begin{aligned} k_0 &= j_1 - 6j_6 x^5 y^5 + 5j_5 x^4 y^4 - 4j_4 x^3 y^3 + 3j_3 x^2 y^2 - 2j_2 x y, \\ k_1 &= (j_2 + 15j_6 x^4 y^4 - 10j_5 x^3 y^3 + 6j_4 x^2 y^2 - 3j_3 x y)(x y + 1), \\ k_2 &= (j_3 - 20j_6 x^3 y^3 + 10j_5 x^2 y^2 - 4j_4 x y)(x y + 1)^2, \\ k_3 &= (j_4 + 15j_6 x^2 y^2 - 5j_5 x y)(x y + 1)^3, \\ k_4 &= (j_5 - 6j_6 x y)(x y + 1)^4, \\ k_5 &= (x y + 1)^5 j_6. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Ce polynôme à coefficients réels a donc une, trois ou cinq solutions réelles pour  $\varepsilon$ . Seules les solutions où  $\varepsilon > 0$  sont valides. Comme il a été discuté au Chapitre 1, les solutions où  $\varepsilon \geq \sin^2(\varphi)$  satisfont  $X X^\dagger = 1$  et les solutions où  $\varepsilon \leq \sin^2(\varphi)$  satisfont  $X^\dagger = X$ .

Lorsque le polynôme est résolu pour  $\varepsilon$ , l'indice de la couche est donné par  $n_1 = n_0 \sqrt{\varepsilon}$ . Le calcul de l'épaisseur, Eq. (1.25), requiert le calcul préalable de  $X$ , donné par les Eqs. (1.9) ou (1.27) selon la condition d'angle critique. En calculant de cette façon, il faut évaluer tous les coefficients de Fresnel pour obtenir les  $a$ ,  $b$  et  $c$ . Toutefois, en utilisant la forme simplifiée de  $X$ ,

$$X = \frac{-b_1 a_1^\dagger + c_1 b_1^\dagger}{(a_1 a_1^\dagger - c_1 c_1^\dagger)(t^2 - 1)}, \quad (\text{A.20})$$

et les Eqs. (A.10) et (A.11), sa valeur peut se calculer plus simplement par le rapport de deux polynômes,

$$X = \frac{g_6 t^8 + f_6 t^6 + f_4 t^4 + f_2 t^2 - g_0 - i (f_7 t^6 + f_5 t^4 + f_3 t^2 + f_1) t}{(t^2 - 1)(g_6 t^6 + g_4 t^4 + g_2 t^2 + g_0)}. \quad (\text{A.21})$$

Le seul terme non réel dans cette équation est  $i$ . Les parties réelles et imaginaires de  $X$  sont donc déjà séparées dans (A.21), facilitant le calcul de  $\ln(X)$  dans l'Eq. (1.25) pour l'épaisseur, lorsque l'on utilise la forme

$$\ln(X) = i \arctan \left( \frac{\text{Im}[X]}{\text{Re}[X]} \right). \quad (\text{A.22})$$

Le choix du quadrant de la tangente inverse doit toutefois tenir compte des signes des parties réelle et imaginaire de  $X$ . L'Eq. (A.21) est également valide pour la condition d'angle critique. Dans le cas où  $t$  est imaginaire, on peut en effet constater aisément que  $X$  selon l'Eq. (A.21) est réel.

Le précédent développement du polynôme peut sembler compliqué, mais il s'agit somme toute de l'expansion explicite de produits et de sommes de polynômes. La prochaine section constitue un sommaire de la méthode ainsi qu'un algorithme pour calculer les solutions avec références aux équations impliquées.

**Sommaire et algorithme.** Que l'équation quadratique pour  $X$ , Eq. (1.3), ait une racine de module unité impose une condition sur les coefficients  $a$ ,  $b$  et  $c$ . L'Eq. (1.10) exprime cette condition. Quand le facteur commun  $C$  est simplifié de l'équation, elle devient un polynôme en  $t$ . De plus, on peut constater que tout facteur réel commun à  $a$  et  $c$  est aussi un facteur au carré du polynôme. Ceci permet de retirer le terme commun  $(t - 1)^2(t + 1)^2$  et conduit au polynôme de l'Eq. (A.1). L'expansion de ce polynôme, qui requiert seulement la multiplication et l'addition de coefficients numériques, donne finalement un 5-nôme pour la constante diélectrique relative  $\varepsilon$ . L'algorithme pour calculer les solutions comprend donc les étapes suivantes:

1. Calculer les  $x$ ,  $y$  et  $z$  complexes avec les  $n_0$ ,  $n_2$ ,  $\varphi$ ,  $\varphi_2$  et la mesure de  $\rho$ , Eqs. (I.13, 1.12-1.14).
2. Calculer les  $\alpha$  complexes avec les  $x$ ,  $y$  et  $z$ , Eqs. (A.9).
3. Calculer les  $g$  réels avec les  $\alpha$ , Eqs. (A.12).
4. Calculer les  $f$  réels avec les  $\alpha$ , Eqs. (A.13).
5. Calculer les  $j$  réels avec les  $f$  et  $g$ , Eqs. (A.16).
6. Calculer les  $k$  réels avec les  $j$ , Eqs. (A.19).
7. Trouver les racines du polynôme, Eq. (A.18).
8. Pour chaque racine réelle valide  $\varepsilon > 0$  :
  - 8.1 Calculer l'indice  $n_1 = +n_0 \varepsilon^{1/2}$  et  $t$ , Eq. (1.11).
  - 8.2 Calculer  $X$ , Eq. (A.21).
  - 8.3 Calculer l'épaisseur  $d$ , Eq. (1.25).

La seule étape itérative est l'étape 7 pour le calcul des racines du polynôme. Une première racine doit être trouvée par itération. Les autres racines sont calculées

avec la solution analytique usuelle pour l'équation du quatrième degré, obtenue après l'extraction de la première racine du polynôme.

## APPENDICE B

### DÉVELOPPEMENT DU POLYNÔME DU SEPTIÈME DEGRÉ POUR UNE COUCHE TRANSPARENTE DANS UN SYSTÈME DE MULTICOUCHES

En utilisant les substitutions 2.14 et 2.30-2.33, les coefficients des Eqs. (2.36) se calculent comme suit :

$$a_0 = -q^2 \alpha_{50} \alpha_{30} + q^2 \alpha_{70} \alpha_{10} \rho ,$$

$$a_1 = q \alpha_{50} \alpha_{31} + q^2 \alpha_{51} \alpha_{30} - q \alpha_{70} \alpha_{11} \rho - q^2 \alpha_{71} \alpha_{10} \rho ,$$

$$a_2 = -\alpha_{50} \alpha_{32} - q \alpha_{51} \alpha_{31} - q^2 \alpha_{52} \alpha_{30} - 2q \alpha_{50} \alpha_{30} \\ + \alpha_{70} \alpha_{12} \rho + q \alpha_{71} \alpha_{11} \rho + q^2 \alpha_{72} \alpha_{10} \rho + 2q \alpha_{70} \alpha_{10} \rho ,$$

$$a_3 = \alpha_{51} \alpha_{32} + q \alpha_{52} \alpha_{31} + \alpha_{50} \alpha_{31} + 2q \alpha_{51} \alpha_{30} \\ - \alpha_{71} \alpha_{12} \rho - q \alpha_{72} \alpha_{11} \rho - \alpha_{70} \alpha_{11} \rho - 2q \alpha_{71} \alpha_{10} \rho ,$$

$$a_4 = -\alpha_{52} \alpha_{32} - \alpha_{51} \alpha_{31} - 2q \alpha_{52} \alpha_{30} \\ - \alpha_{50} \alpha_{30} + \alpha_{72} \alpha_{12} \rho + \alpha_{71} \alpha_{11} \rho + 2q \alpha_{72} \alpha_{10} \rho + \alpha_{70} \alpha_{10} \rho ,$$

$$a_5 = \alpha_{52} \alpha_{31} + \alpha_{51} \alpha_{30} - \alpha_{72} \alpha_{11} \rho - \alpha_{71} \alpha_{10} \rho ,$$

$$a_6 = -\alpha_{52} \alpha_{30} + \alpha_{72} \alpha_{10} \rho ,$$

$$b_2 = \alpha_{50} \alpha_{32} - q \alpha_{51} \alpha_{31} + q^2 \alpha_{52} \alpha_{30} + 2q \alpha_{50} \alpha_{30} \\ - \alpha_{70} \alpha_{12} \rho + q \alpha_{71} \alpha_{11} \rho - q^2 \alpha_{72} \alpha_{10} \rho - 2q \alpha_{70} \alpha_{10} \rho ,$$

$$b_4 = \alpha_{52}\alpha_{32} - \alpha_{51}\alpha_{31} + 2q\alpha_{52}\alpha_{30} + \alpha_{50}\alpha_{30} \\ - \alpha_{72}\alpha_{12}\rho + \alpha_{71}\alpha_{11}\rho - 2q\alpha_{72}\alpha_{10}\rho - \alpha_{70}\alpha_{10}\rho.$$

L'expansion des deux termes de l'Eq. (2.37) donne

$$(a a^\dagger - c c^\dagger)^2 = 4t^2 (g_{10}t^{10} + g_8t^8 + g_6t^6 + g_4t^4 + g_2t^2 + g_0)^2, \\ (-b a^\dagger + c b^\dagger)(-a b^\dagger + b c^\dagger) = \\ 4t^2 \left| \begin{array}{l} g_{10}t^{10} + f_9i t^9 + f_8t^8 + f_7i t^7 + f_6t^6 \\ + f_5i t^5 + f_4t^4 + f_3i t^3 + f_2t^2 + f_1i t + g_0 \end{array} \right|^2,$$

avec

$$g_0 = a_0 a_1^\dagger + a_1 a_0^\dagger,$$

$$g_2 = a_0 a_3^\dagger + a_1 a_2^\dagger + a_2 a_1^\dagger + a_3 a_0^\dagger,$$

$$g_4 = a_0 a_5^\dagger + a_1 a_4^\dagger + a_2 a_3^\dagger + a_3 a_2^\dagger + a_4 a_1^\dagger + a_5 a_0^\dagger,$$

$$g_6 = a_1 a_6^\dagger + a_2 a_5^\dagger + a_3 a_4^\dagger + a_4 a_3^\dagger + a_5 a_2^\dagger + a_6 a_1^\dagger,$$

$$g_8 = a_3 a_6^\dagger + a_4 a_5^\dagger + a_5 a_4^\dagger + a_6 a_3^\dagger,$$

$$g_{10} = a_5 a_6^\dagger + a_6 a_5^\dagger,$$

$$f_1 = (-a_0 a_2^\dagger + a_2 a_0^\dagger + b_2 a_0^\dagger - a_0 b_2^\dagger)i,$$

$$f_2 = a_0 a_3^\dagger - b_2 a_1^\dagger + a_3 a_0^\dagger - a_1 b_2^\dagger,$$

$$f_3 = (-a_0 a_4^\dagger + b_2 a_2^\dagger + a_4 a_0^\dagger + b_4 a_0^\dagger - a_0 b_4^\dagger - a_2 b_2^\dagger)i,$$

$$f_4 = a_0 a_5^\dagger - b_2 a_3^\dagger - b_4 a_1^\dagger + a_5 a_0^\dagger - a_1 b_4^\dagger - a_3 b_2^\dagger,$$



$$f_5 = (b_2 a_4^\dagger + b_4 a_2^\dagger - a_2 b_4^\dagger - a_4 b_2^\dagger) i ,$$

$$f_6 = a_1 a_6^\dagger - b_2 a_5^\dagger - b_4 a_3^\dagger + a_6 a_1^\dagger - a_3 b_4^\dagger - a_5 b_2^\dagger ,$$

$$f_7 = (a_2 a_6^\dagger + b_2 a_6^\dagger + b_4 a_4^\dagger - a_6 a_2^\dagger - a_4 b_4^\dagger - a_6 b_2^\dagger) i ,$$

$$f_8 = a_3 a_6^\dagger - b_4 a_5^\dagger + a_6 a_3^\dagger - a_5 b_4^\dagger ,$$

$$f_9 = (a_4 a_6^\dagger + b_4 a_6^\dagger - a_6 a_4^\dagger - a_6 b_4^\dagger) i ,$$

et l'expansion totale est un 8-nôme en  $s = t^2$  lorsque 4  $s^2$  est simplifié

$$4(j_8 s^8 + j_7 s^7 + j_6 s^6 + j_5 s^5 + j_4 s^4 + j_3 s^3 + j_2 s^2 + j_1 s + j_0) s^2 = 0.$$

Les coefficients  $j$  sont :

$$j_0 = -f_1^2 - 2f_2 g_0 + 2g_2 g_0 ,$$

$$j_1 = -f_2^2 - 2f_3 f_1 + g_2^2 - 2f_4 g_0 + 2g_4 g_0 ,$$

$$j_2 = -f_3^2 - 2f_4 f_2 - 2f_5 f_1 + 2g_4 g_2 - 2f_6 g_0 + 2g_6 g_0 ,$$

$$j_3 = -f_4^2 - 2f_5 f_3 - 2f_6 f_2 - 2f_7 f_1 + g_4^2 + 2g_6 g_2 - 2f_8 g_0 + 2g_8 g_0 ,$$

$$j_4 = -f_5^2 - 2f_6 f_4 - 2f_7 f_3 - 2f_8 f_2 - 2f_9 f_1 + 2g_6 g_4 + 2g_8 g_2 ,$$

$$j_5 = -f_6^2 - 2f_7 f_5 - 2f_8 f_4 - 2f_9 f_3 - 2f_{10} g_2 + g_6^2 + 2g_8 g_4 + 2g_{10} g_2 ,$$

$$j_6 = -f_7^2 - 2f_8 f_6 - 2f_9 f_5 - 2f_{10} g_4 + 2g_8 g_6 + 2g_{10} g_4 ,$$

$$j_7 = -f_8^2 - 2f_9 f_7 - 2f_{10} g_6 + g_8^2 + 2g_{10} g_6 ,$$

$$j_8 = -f_9^2 - 2f_{10} g_8 + 2g_{10} g_8 .$$

L'Eq. (2.14) permet d'exprimer le polynôme en puissances de la variable physique  $\varepsilon = s - q$ . On obtient alors

$$\left(k_7 \varepsilon^7 + k_6 \varepsilon^6 + k_5 \varepsilon^5 + k_4 \varepsilon^4 + k_3 \varepsilon^3 + k_2 \varepsilon^2 + k_1 \varepsilon + k_0\right) \varepsilon + z = 0, \quad (\text{B.1})$$

où les coefficients  $k$  sont

$$k_0 = -8j_8 q^7 + 7j_7 q^6 - 6j_6 q^5 + 5j_5 q^4 - 4j_4 q^3 + 3j_3 q^2 - 2j_2 q + j_1,$$

$$k_1 = 28j_8 q^6 - 21j_7 q^5 + 15j_6 q^4 - 10j_5 q^3 + 6j_4 q^2 - 3j_3 q + j_2,$$

$$k_2 = -56j_8 q^5 + 35j_7 q^4 - 20j_6 q^3 + 10j_5 q^2 - 4j_4 q + j_3,$$

$$k_3 = 70j_8 q^4 - 35j_7 q^3 + 15j_6 q^2 - 5j_5 q + j_4,$$

$$k_4 = -56j_8 q^3 + 21j_7 q^2 - 6j_6 q + j_5,$$

$$k_5 = 28j_8 q^2 - 7j_7 q + j_6,$$

$$k_6 = -8j_8 q + j_7,$$

$$k_7 = j_8.$$

Le terme  $z$  est

$$z = j_8 q^8 - j_7 q^7 + j_6 q^6 - j_5 q^5 + j_4 q^4 - j_3 q^3 + j_2 q^2 - j_1 q + j_0 \quad (\text{B.2})$$

et, comme dans le problème de la couche unique, ce terme constant issu du changement de variable de  $s$  à  $\varepsilon$  est nul. Pour prouver cela, il faut exprimer les coefficients  $j$  en termes des paramètres initiaux du problème, les  $u_{ijs}$ ,  $u_{ijp}$ ,  $v_{ijs}$ ,  $v_{ijp}$ ,  $\rho$  et  $q$ . Contrairement au cas de la couche unique, la complexité de cette opération dépasse les capacités de l'ordinateur et/ou du logiciel utilisés. Il a donc fallu

séparer le calcul en plusieurs sous-opérations. Chaque coefficient  $j$  étant un polynôme de puissances de  $q$ , l'Eq. (B.2) a été développée comme un polynôme de  $q$  et chaque coefficient a pu séparément être prouvé égal à zéro. En faisant cela, on peut constater qu'il n'est pas nécessaire de remonter les substitutions jusqu'aux éléments de matrices  $u$  et  $v$ , mais que les coefficients s'annulent lorsqu'ils sont exprimés en fonction des  $\alpha_{ij}$ .

Puisque  $z$  est nul dans l'Eq. (B.1), le polynôme final est du septième degré après simplification

$$k_7 \varepsilon^7 + k_6 \varepsilon^6 + k_5 \varepsilon^5 + k_4 \varepsilon^4 + k_3 \varepsilon^3 + k_2 \varepsilon^2 + k_1 \varepsilon + k_0 = 0. \quad (\text{B.3})$$

## APPENDICE C

### DÉVELOPPEMENT DU POLYNÔME DU HUITIÈME DEGRÉ POUR L'ÉPAISSEUR DE DEUX COUCHES TRANSPARENTES DANS UN SYSTÈME DE MULTICOUCHES

Dans cet Appendice, on donne de façon explicite la façon de calculer les coefficients pour résoudre le polynôme en  $X_l$ . Les coefficients  $a$ ,  $b$  et  $c$  dans les Eqs. (3.10-12) sont quadratiques en  $X_l$  :

$$\begin{aligned}a &= a_2 X_l^2 + a_1 X_l + a_0, \\b &= b_2 X_l^2 + b_1 X_l + b_0, \\c &= c_2 X_l^2 + c_1 X_l + c_0.\end{aligned}\tag{C.1}$$

Les coefficients  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$  dépendent des éléments des matrices  $T$ ,  $U$ ,  $V$ , et du rapport ellipsométrique mesuré  $\rho$ , soit

$$\begin{aligned}a_0 &= \alpha u_{21p} u_{21s} v_{11p} v_{11s}, \\a_1 &= \alpha \left( u_{21p} u_{22s} v_{11p} v_{21s} + u_{22p} u_{21s} v_{21p} v_{11s} \right), \\a_2 &= \alpha u_{22p} u_{22s} v_{21p} v_{21s}, \\b_0 &= \left( \beta_1 u_{11p} u_{21s} + \beta_2 u_{21p} u_{11s} \right) v_{11p} v_{11s},\end{aligned}$$

$$b_1 = (\beta_1 u_{11p} u_{22s} + \beta_2 u_{21p} u_{12s}) v_{11p} v_{21s} + (\beta_1 u_{12p} u_{21s} + \beta_2 u_{22p} u_{11s}) v_{21p} v_{11s} ,$$

$$b_2 = (\beta_1 u_{12p} u_{22s} + \beta_2 u_{22p} u_{12s}) v_{21p} v_{21s} ,$$

$$c_0 = \chi u_{11p} u_{11s} v_{11p} v_{11s} ,$$

$$c_1 = \chi (u_{11p} u_{12s} v_{11p} v_{21s} + u_{12p} u_{11s} v_{21p} v_{11s}) ,$$

$$c_2 = \chi u_{12p} u_{12s} v_{21p} v_{21s} ,$$

où

$$\alpha = -t_{22p} t_{12s} + t_{12p} t_{22s} \rho ,$$

$$\beta_1 = -t_{21p} t_{12s} + t_{11p} t_{22s} \rho ,$$

$$\beta_2 = -t_{22p} t_{11s} + t_{12p} t_{21s} \rho ,$$

$$\chi = -t_{21p} t_{11s} + t_{11p} t_{21s} \rho .$$

Dans le cas le plus usuel où  $X_j$  et  $X_l$  ont tous deux un module unité on aura

$$a a^\dagger - c c^\dagger = \frac{f_0^\dagger X_l^4 + f_1^\dagger X_l^3 + f_2 X_l^2 + f_1 X_l + f_0}{X_l^2}$$

et

$$-b a^\dagger + c b^\dagger = \frac{g_4 X_l^4 + g_3 X_l^3 + g_2 X_l^2 + g_1 X_l + g_0}{X_l^2},$$

$$-a b^\dagger + b c^\dagger = \frac{g_0^\dagger X_l^4 + g_1^\dagger X_l^3 + g_2^\dagger X_l^2 + g_3^\dagger X_l + g_4^\dagger}{X_l^2},$$

où les  $f$  et  $g$  s'expriment comme

$$f_0 = -c_0 c_2^\dagger + a_0 a_2^\dagger,$$

$$f_1 = a_1 a_2^\dagger + a_0 a_1^\dagger - c_1 c_2^\dagger - c_0 c_1^\dagger,$$

$$f_2 = a_2 a_2^\dagger + a_1 a_1^\dagger + a_0 a_0^\dagger - c_2 c_2^\dagger - c_1 c_1^\dagger - c_0 c_0^\dagger,$$

$$g_0 = c_0 b_2^\dagger - b_0 a_2^\dagger,$$

$$g_1 = -b_1 a_2^\dagger - b_0 a_1^\dagger + c_1 b_2^\dagger + c_0 b_1^\dagger,$$

$$g_2 = -b_2 a_2^\dagger - b_1 a_1^\dagger - b_0 a_0^\dagger + c_2 b_2^\dagger + c_1 b_1^\dagger + c_0 b_0^\dagger,$$

$$g_3 = -b_2 a_1^\dagger - b_1 a_0^\dagger + c_2 b_1^\dagger + c_1 b_0^\dagger,$$

$$g_4 = -b_2 a_0^\dagger + c_2 b_0^\dagger.$$

On obtient finalement un 8-nôme en  $X_l$ ,

$$\begin{aligned} h_0^\dagger X_l^8 + h_1^\dagger X_l^7 + h_2^\dagger X_l^6 + h_3^\dagger X_l^5 + h_4 X_l^4 + \\ h_3 X_l^3 + h_2 X_l^2 + h_1 X_l + h_0 = 0 \end{aligned} \quad , \quad (C2)$$

dont les coefficients  $h$  sont définis par

$$h_0 = -g_0 g_4^\dagger + f_0^2,$$

$$h_1 = 2f_1 f_0 - g_1 g_4^\dagger - g_0 g_3^\dagger,$$

$$h_2 = f_1^2 + 2f_2 f_0 - g_2 g_4^\dagger - g_1 g_3^\dagger - g_0 g_2^\dagger,$$

$$h_3 = 2f_2 f_1 + 2f_0 f_1^\dagger - g_3 g_4^\dagger - g_2 g_3^\dagger - g_1 g_2^\dagger - g_0 g_1^\dagger$$

et

$$h_4 = f_2^2 + 2f_1 f_1^\dagger + 2f_0 f_0^\dagger - g_4 g_4^\dagger - g_3 g_3^\dagger - g_2 g_2^\dagger - g_1 g_1^\dagger - g_0 g_0^\dagger.$$

La symétrie de conjugaison entre les coefficients de  $X_l^m$  et  $X_l^{8-m}$  implique que si  $r$  est une racine du polynôme, alors  $1/r^\dagger$  en est aussi une racine. Les racines sont donc soit couplées  $(r, 1/r^\dagger)$  ou ont un module unité. On a à chercher les racines d'un polynôme complexe qui appartiennent au cercle unité du plan complexe. La transformation

$$x_l = \frac{i(-X_l \gamma + 1)}{X_l \gamma + 1} \quad \text{ou} \quad X_l = \frac{-x_l + i}{\gamma(x_l + i)} \quad (\text{C.3})$$

peut être utilisée pour projeter le cercle unité sur l'axe réel,  $\gamma$  étant une constante quelconque de module unité. La substitution de variable Eq. (C.3) transforme l'Eq. (C.2) en un 8-nôme réel en  $x_l$ . La solution pour les racines se réduit par conséquent à la tâche plus simple de trouver les racines réelles d'un polynôme réel.

Si  $j_n$  est le coefficient de  $x_l^n$  dans le polynôme transformé, il se calcule à partir des coefficients  $h$  avec la transformation linéaire suivante

$$\begin{pmatrix} j_0 \\ j_1 \\ j_2 \\ j_3 \\ j_4 \\ j_5 \\ j_6 \\ j_7 \\ j_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -8i & -6i & -4i & -2i & 0 & 2i & 4i & 6i & 8i \\ -28 & -14 & -4 & 2 & 4 & 2 & -4 & -14 & -28 \\ 56i & 14i & -4i & -6i & 0 & 6i & 4i & -14i & -56i \\ 70 & 0 & -10 & 0 & 6 & 0 & -10 & 0 & 70 \\ -56i & 14i & 4i & -6i & 0 & 6i & -4i & -14i & 56i \\ -28 & 14 & -4 & -2 & 4 & -2 & -4 & 14 & -28 \\ 8i & -6i & 4i & -2i & 0 & 2i & -4i & 6i & -8i \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_0 \gamma^4 \\ h_1 \gamma^3 \\ h_2 \gamma^2 \\ h_3 \gamma \\ h_4 \\ h_3^\dagger \gamma^\dagger \\ h_2^\dagger [\gamma^\dagger]^2 \\ h_1^\dagger [\gamma^\dagger]^3 \\ h_0^\dagger [\gamma^\dagger]^4 \end{pmatrix}.$$

Une constante  $\gamma$  donnée pour la transformation Eq. (C.2) peut ne pas convenir pour transformer le polynôme d'un système particulier dans le cas fortuit où  $X_l \approx -1/\gamma$  est une racine. Une telle situation se détecte lorsque  $j_8$  est zéro ou très petit en valeur absolue relativement aux autres coefficients. On doit choisir une autre valeur de  $\gamma$  pour résoudre les équations dans un tel cas.

Un développement similaire peut être fait dans le cas où  $X_l$  est réel. Dans ce cas, on obtient directement un polynôme réel pour  $X_l$  et il n'y a pas lieu d'utiliser une transformation.

Seules les racines réelles pour  $x_l$  sont à prendre en considération; le nombre de solutions à une mesure donnée est donc de 0, 2, 4, 6 ou au plus 8. S'il n'existe aucune solution à l'intérieur de la marge d'erreur expérimentale, cela indique que les paramètres du modèle peuvent être inappropriés pour le système étudié. Habituellement, comme dans l'exemple numérique du Chapitre 3, il y a deux solutions possibles et alors on doit disposer d'informations externes ou effectuer



une autre mesure à un second angle d'incidence pour identifier la solution correspondant au système.

Après que les racines  $x_l$  du 8-nôme sont trouvées,  $X_l$  est calculé en utilisant l'Eq. (C.3). L'épaisseur  $d_l$  est calculée avec  $X_l$  en inversant l'Eq. (3.5):

$$d_l = \frac{1}{4} \frac{i \lambda \ln(X_l)}{\pi n_l \cos(\varphi_l)} + \frac{1}{2} \frac{m \lambda}{n_l \cos(\varphi_l)}. \quad (\text{C.4})$$

Pour la seconde couche,  $X_j$  est calculé avec l'Eq. (3.14) ou l'Eq. (3.16) selon le cas, en calculant d'abord les coefficients  $a$ ,  $b$ , et  $c$  de l'Eq. (C.1) avec la valeur connue de  $X_j$ . L'épaisseur  $d_j$  est calculée de  $X_j$  en utilisant l'inversion (C.4) avec  $l$  substitué par  $j$ . La même procédure est appliquée à toutes les racines réelles pour établir toutes les solutions possibles.

## APPENDICE D

### LES PROGRAMMES

Cet Appendice donne le code source des programmes utilisés pour résoudre les équations ellipsométriques décrites dans les différents chapitres de cet ouvrage. Les équations ont été programmées dans plusieurs logiciels par moi-même et Stoyan C. Roussev. Les équations furent développées sur le logiciel d'algèbre symbolique *Theorist*, puis testées numériquement de façon plus intensive avec *MatLab*.

Pour les tests de vitesse d'exécution de la couche transparente unique (Chapitre 1), la méthode polynomiale, ainsi que la méthode de Reinberg<sup>20</sup> et celle de Yoriome<sup>18</sup>, ont été programmées en Pascal pour permettre une comparaison du temps de calcul et ainsi apprécier l'efficacité de la méthode polynomiale. Il s'agit des trois programmes Pascal nommés judicieusement **Polynomial**, **Reinberg** et **Yoriome**, qui sont dans cet Appendice. La version incluse du programme **Polynomial** ne calcule pas les cinq solutions du 5-nôme (Eq. (A.15)) mais une seule solution réelle du 6-nôme de l'Eq. (A.18). C'est la version utilisée pour fin de comparaison des temps de calcul. Pour évaluer le temps de calcul, chaque procédure de solution est évaluée 1000 fois avec des paramètres de départ semblables.

Une version, non fournie ici, et calculant les cinq solutions comprendrait comme modifications et calculs supplémentaires :

- a) le calcul des coefficients du 5-nôme (Eq. (A.19)) dans la procédure *coefficients*;
- b) un calcul par la fonction *FirstRoot* d'une racine réelle du 5-nôme (et non du 6-nôme);
- c) un calcul pour extraire la racine trouvée et produire un 4-nôme;
- d) un calcul analytique des racines du 4-nôme.

Pour la couche transparente dans un système de multicouches (Chapitre 2), il n'y a pas de programme dans cet Appendice, les équations n'ayant été développées et testées que dans *Theorist*. Les équations produites dans le Chapitre 2 ont toutefois été copiées directement du document *Theorist* au logiciel de traitement de texte et constituent de ce fait une liste du "programme" qu'il n'est pas nécessaire de reproduire ici.

Le dernier programme *D1D2.M*, rédigé pour *MatLab*, ne calcule les solutions que pour le cas particulier de deux épaisseurs d'un système à deux couches transparentes. Ce programme a été utilisé pour calculer les courbes et les exemples numériques du chapitre 3. Un programme pour le cas plus général (épaisseurs de deux couches dans un système de multicouches) a été écrit et testé par Stoyan C. Roussev et Daniel Ducharme. Je ne dispose pas de copie de ce programme pour l'inclure ici, mais comme dans le cas du Chapitre 2, les équations du Chapitre 3 développées avec *Theorist* pour le cas général ont été copiés directement dans le traitement de texte.

## Program Polynomial;

type

float = double;

var

{ temps de l'horloge !!! code dépendant de la machine !!!}

SystemTicks : longint absolute \$40:\$6C;

t0, count : longint;

time : real;

const

deg : float = pi / 180;

pi2 : float = 2\*pi;

ov4pi : float = 1 / (4\*pi);

ClockFreq = 18.2;

var

del,psi,	{ angles ellipsométriques (rad) }
n0,	{ indice du milieu ambiant }
rn2,in2,	{ parties réelles et imag. de l'indice du substrat }
wl,	{ longueur d'onde (nm) }
phi,sinphi,cosphi,tanphi,	{ angle d'incidence (rad) et ses fonctions trig. }
n0sinphi,n0cosphi, d_cte,	{ valeurs intermédiaires de calcul }
n0sinphi_2,n0cosphi_2,	{ valeurs intermédiaires de calcul }
eps1,n1,d,	{ const. diél., indice et épaisseur de la couche }
s,	{ variable du 6-nôme Eq. (A.15) }
j0,j1,j2,j3,j4,j5,j6,	{ coefficients du 6-nôme }
g0,g2,g4,g6,	{ coefficients intermédiaires }
f1,f2,f3,f4,f5,f6,f7 : float;	{ coefficients intermédiaires }
i:word;	{ compteur }

```
function Arg (re,im : float) : float;
{   Arg calcule l'argument (phase) d'un nombre complexe re + i*im
    Arg se situe entre 0 et 2*pi }

const
    pi2 : float = 2*pi;
    halfpi : float = 0.5*pi;
    half3pi : float = 1.5*pi;

begin
    if re > 0.0 then
        if im >= 0.0 then Arg := arctan(im/re)
        else Arg := arctan(im/re) + pi2
    else if re < 0.0 then
        Arg := arctan(im/re) + pi
    else
        if im > 0.0 then
            Arg := halfpi
        else if im < 0.0 then
            Arg := half3pi
        else { cas indéterminé 0/0 }
            Arg := 0.0;
end;

function FirstRoot : float;
{   calcule par approximations successives la racine réelle du 6-nôme
    l'approximation suivante x3 se calcule par l'intersection avec l'axe x
    de la droite passant par (x1, y1) et (x2, y2) }

const
    limit = 1e-6;    { critère de convergence }
var
    x1,y1,x2,y2,x3 : float;
```

begin

  x1 := 9.21; { 9.21 index = 1.4 }

  y1 := j0+x1\*(j1+x1\*(j2+x1\*(j3+x1\*(j4+x1\*(j5+x1\*j6))));

  x2 := 11.69; { 11.69 index = 1.5 }

  while abs(x1-x2) > limit do

    begin

      y2 := j0+x2\*(j1+x2\*(j2+x2\*(j3+x2\*(j4+x2\*(j5+x2\*j6))));

      x3:= (x2\*y1-x1\*y2)/(y1-y2); { calcul de l'intersection }

      x1 := x2;

      y1 := y2;

      x2 := x3;

    end;

  FirstRoot := x2;

end;

procedure coefficients;

{ calcule les coefficients du polynôme à partir de l'angle d'incidence,  
de l'indice du substrat et des angles ellipsométriques }

var

  tanpsi, { tan(psi) }

  rro,iro, { parties réelles et imag. du rapport  
          ellipsométrique rho }

  rx,ix, { Eq. (1.12) x= rx +i\*ix }

  ry,iy, { Eq. (1.13) y = ry +i\*iy }

  cz,rz,iz, { Eq. (1.14) z = rz +i\*iz }

  ry2,iy2,rxz,ixz,rxyz,ixyz, { valeurs intermédiaires de calcul }

  ru,iu,rxyxz,ixyxz, { valeurs intermédiaires de calcul }

  ra0,ia0,ra1,ia1,ra2,ia2, { Eq. (A.9) alpha# = ra# + i\*ia# #=0...5 }

  ra3,ia3,ra4,ia4,ra5,ia5,

{ valeurs intermédiaires de calcul }

  xy,xyo1,xyo2,xyo3,xyo4,xyo5,

  rn2\_2,in2\_2,mod\_n2\_2,tmp,rcosphi2\_2,icosphi2\_2,modcosphi2\_2,

  rcosphi2,icosphi2,ry\_2,iy\_2,norm : float;

```

begin
  { parties réelles et imag. de ro }
  tanpsi:=sin(psi)/cos(psi);
  rro:=cos(del)*tanpsi;
  iro:=sin(del)*tanpsi;

  { parties réelles et imag. de z }
  cz:=1/(Sqr(rro+1)+Sqr(iro));
  rz:=- (Sqr(iro)+Sqr(rro)-1)*cz;
  iz:=-2*cz*iro;

  { parties réelles et imag. de cos(phi2) }
  rn2_2:=Sqr(rn2);
  in2_2:=Sqr(in2);
  mod_n2_2:=in2_2+rn2_2;
  tmp:= Sqr(n0sinphi/mod_n2_2);
  rcosphi2_2:= 1+tmp*(in2_2-rn2_2);
  icosphi2_2:= tmp*rn2*in2;
  icosphi2_2:= icosphi2_2+icosphi2_2;
  modcosphi2_2:= sqrt(Sqr(rcosphi2_2)+Sqr(icosphi2_2));
  rcosphi2:= sqrt(0.5*abs(modcosphi2_2+rcosphi2_2));
  icosphi2:= sqrt(0.5*abs(modcosphi2_2-rcosphi2_2));
  if icosphi2_2 < 0 then icosphi2 := -icosphi2;

  { parties réelles et imag. de y=-n2*cos(phi2)/(n0*cos(phi)) }
  tmp:=1/(N0cosphi);
  ry:=tmp*(in2*icosphi2-rn2*rcosphi2);
  iy:=-tmp*(icosphi2*rn2+rcosphi2*in2);

  { parties réelles et imag. de x=sqr(tanphi)/y }
  xy:=Sqr(tanphi);
  ry_2:= Sqr(ry);
  iy_2:= Sqr(iy);
  tmp:=xy/(ry_2+iy_2);
  rx:=ry*tmp;
  ix:=-iy*tmp;

```

```

{ parties réelles et imag. de y*y }
ry2:=-iy_2+ry_2;
iy2:=iy*ry;
iy2:=2*iy2;

{ résultats intermédiaires pour le calcul des alphas }
rxyz := rz*xy;
ixyz := iz*xy;
rxz := -ix*iz+rx*rz;
ixz := iz*rx+ix*rz;
ru := rxz+rxz+(rxz+2)*xy+1;
iu := (xy+2)*ixz;
rxyxz := rxz*xy;
ixyxz := ixz*xy;

{ calcul des alphas, Eq. (A.9) }
ra0 := (-ixyz*iy+rxyz*ry)*xy;
ia0 := (iy*rxyz+ixyz*ry)*xy;
ra1 := -ixyz*iy2+rxyz*ry2+xy*(rxyz+rxyz+ry);
ia1 := ixyz*ry2+iy2*rxyz+xy*(ixyz+ixyz+iy);
ra2 := ry2+rxyxz+2*(-ixyz*iy+rxyz*ry+xy);
ia2 := iy2+ixyxz+2*(iy*rxyz+ixyz*ry);
ra3 := rx+rxyz+ry+ry;
ia3 := ix+ixyz+iy+iy;
ra4 := -ry2+ru;
ia4 := -iy2+iu;
ra5 := iu*iy2-ru*ry2+rxyxz;
ia5 := -iu*ry2+ixyxz-iy2*ru;

{ calcul des g Eq. (A.12) }
g0 := ia1*ia0+ra1*ra0;
g2 := ia2*ia1+ia3*ia0+ra2*ra1+ra3*ra0;
g4 := ia3*ia2+ra3*ra2+ra1;
g6 := ra3;

```



```

{ calcul des f Eq. (A.13) }
f1 := ia0*ra5+ia0*ra2-ia5*ra0-ia2*ra0;
f2 :=ia5*ia1-ia3*ia0+ra5*ra1-ra3*ra0;
f3 :=ia0+ia2*ra5+ia0*ra4-ia5*ra2-ia4*ra0;
f4 :=ia5*ia3+ia4*ia1+ra5*ra3+ra4*ra1;
f5 :=-ia5+ia0+ia2*ra4-ia4*ra2;
f6 :=ia4*ia3+ra4*ra3+ra1;
f7 :=-ia4+ia2;

{ calcul des j Eq. (A.16) }
j0 := (Sqr(f1)+2*g0*(g0-f2-g2));
j1 := (Sqr(f2)+2*f3*f1-Sqr(g2)+(4*g2-g0-2*(f4+g4))*g0);
j2 := (Sqr(f3)+2*(f4*f2+f5*f1+(-g4+g2)*g2+(-f6-g6+2*g4-g2)*g0));
j3 := (Sqr(f4)+2*(f5*f3+f6*f2+f7*f1)-Sqr(g4)+(-2*g6+4*g4-g2)*g2+2*(g6-g4)*g0);
j4 := (Sqr(f5)+2*(f6*f4+f7*f3+(-g6+g4-g2)*g4+(f2+2*g2-g0)*g6));
j5 := (Sqr(f6)+2*f7*f5+(-g6+4*g4+2*(f4-g2))*g6-Sqr(g4));
j6 := Sqr(f7)+2*(f6+g6-g4)*g6;

end;

procedure Thickness;
{ calcul de l'épaisseur de la couche à partir de la constante
diélectrique Eq. (1.25).  $X = \text{Re}X + i\text{Im}X$  se calcule par l'Eq. (A.21)}
var
  t, t2, ReX, ImX, denom : float;

begin
  D := 0;
  if eps1 > 0 then
    begin
      n1 := sqrt (eps1);
      t2 := (eps1 - N0sinphi_2)/n0cosphi_2;
      denom := (t2-1)*(g0+t2*(g2+t2*(g4+t2*g6)));
      denom := 1/denom;
      if t2 > 0 then

```

```

begin
    t := sqrt(t2);
    ImX := -t*denom*(f1+t2*(f3+t2*(f5+t2*f7)));
    ReX := (-g0+t2*(f2+t2*(f4+t2*(f6+t2*g6))))*denom;
    D := d_cte*(-Arg(ReX,ImX)+pi2)/t;
end
else
begin
    t := sqrt(-t2);
    ReX := -g0+t2*(f2+t2*(f4+t2*(f6+t2*g6)))
        + t*(f1+t2*(f3+t2*(f5+f7*t2)));
    ReX := ReX*denom;
    if ReX > 1 then
        D := d_cte*ln(ReX)/t;
    end;
end;
end;
end;

```

```

procedure SetData;

```

```

    { calcule et assigne les paramètres et constantes pour démarrer
      la recherche de la solution }

```

```

begin
    psi := 14.27*deg;
    del := 137.45*deg;
    n0 := 1;
    rn2 := 4.08;
    in2 := -0.028;
    phi := 70*deg;
    wl := 546.1;
    sinphi := sin(phi);
    cosphi := cos(phi);
    tanphi := sinphi/cosphi;
    n0sinphi := n0*sinphi;
    n0sinphi_2 := Sqr(n0sinphi);
    n0cosphi := n0*cosphi;

```

```
n0cosphi_2 := Sqr(n0cosphi);
d_cte := ov4pi*w1/n0cosphi;
end;

begin
  t0 := SystemTicks;      { retient le temps du début d'exécution }
  count := 1000;          { exécute la recherche de solution 1000 fois }

  for i:=1 to count do
    begin
      SetData;              { assigne les paramètres }
      coefficients;          { calcule les coefficients }
      s := FirstRoot;        { calcule la racine }
      eps1 := s*sqr(cosphi)+sqr(sinphi); { calcule la const. diél. }
      Thickness;             { calcule l'épaisseur }
    end;

    { calcule le temps d'exécution }
    time := 1000*(SystemTicks - t0)/(ClockFreq*count);

    { affiche les résultats }
    writeln (n1,D);
    writeln (time:7:2);
  END.
```

## Program Reinberg;

type

float = double;

const

deg : float = pi / 180;

pi2 : float = pi\*2;

ovpi4 : float = 1/(pi\*4);

ClockFreq = 18.2;

var

{ temps de l'horloge !!! code dépendant de la machine !!!}

SystemTicks : longint absolute \$40:\$6C;

t0, count : longint;

time : real;

var

phi, sinphi, cosphi, { angle d'incidence (rad) et ses fonction trig. }

del, psi, { angles ellipsométriques (rad) }

rro, iro, { rapport ellipsométrique rho = rro + i\* iro }

n\_0, { indice du milieu ambiant }

n\_1, { indice de la couche }

dn\_1, { incrément de recherche de solution }

m2, in2, { indice du substrat n2 = m2 + i\*in2 }

{ valeurs intermédiaires de calcul }

t\_0, n\_0sinphi,

t\_1, cosphi1,m2\_2, in2\_2, mod\_n2\_2, tmp1, tmp2, rcosphi2\_2, icosphi2\_2,

modcosphi2\_2, rcosphi2, icosphi2, rp\_1, rs\_1, sqrmodrs\_2, sindel, cosdel,

tanpsi, sqrmodcosphi2, sqrcosphi1, sqr\_t\_1, sqrmodrp\_2,w1,d,d\_cte,

n\_0sinphi\_2, n\_1\_2, rt\_2, it\_2,rrs\_2, irs\_2, rrp\_2, irp\_2,

ru\_12, iu\_12, ru\_21, iu\_21, rsrpro, rrprs\_2, irprs\_2, rprs\_1,

rE, iE, rB, iB, rC,iC, rD, iD, rF, imF, mF, rY, iY, rY1, iY1, rY2, iY2,

lnr, lnr0, lnr1, lnr2, n\_10, n\_11, n\_next, sqrmodt\_2 : float;

```
j : longint;
```

```
function Arg (re,im : float) : float;
{ Arg calcule l'argument (phase) d'un nombre complexe re + i*im
  Arg se situe entre 0 et 2*pi }
  pi2 : float = 2*pi;
  halfpi : float = 0.5*pi;
  half3pi : float = 1.5*pi;
begin
  if re > 0.0 then
    if im >= 0.0 then Arg := arctan(im/re)
    else Arg := arctan(im/re) + pi2
  else if re < 0.0 then
    Arg := arctan(im/re) + pi
  else if im > 0.0 then
    Arg := halfpi
  else if im < 0.0 then
    Arg := half3pi
  else { cas indéterminé 0/0 }
    Arg := 0.0;
end;
```

```
procedure SetData;
{ calcule et assigne les paramètres et constantes pour démarrer
  la recherche de la solution }
begin
  phi := 70*deg;
  del := 137.45*deg;
  psi := 14.27*deg;
  rn2 := 4.08;
  in2 := -0.028;
  wl := 5461;
  n_0 := 1;
```

```

n_1 := 1.84;
dn_1 := 0.02;
end;

```

```

procedure Initialize;
{ calcule tous les paramètres dont la valeur est indépendante
  d'une itération à l'autre }
begin
  sinphi:=sin(phi);
  cosphi:=cos(phi);
  t_0 := n_0*cosphi;
  n_0sinphi := n_0*sinphi;
  n_0sinphi_2 := Sqr(n_0sinphi);
  sindel := sin(del);
  cosdel := cos(del);
  tanpsi := sin(psi) / cos(psi);
  rro := tanpsi*cosdel;
  iro := tanpsi*sindel;
  d_cte := wl*ovpi4;

  { real and imag parts of cos(phi2) }
  rn2_2:=Sqr(rn2);
  in2_2:=Sqr(in2);
  mod_n2_2:=in2_2+rn2_2;
  tmp1:= Sqr(n_0sinphi / mod_n2_2);
  rcosphi2_2:= 1+tmp1*(in2_2-rn2_2);
  icosphi2_2:= tmp1*rn2*in2;
  icosphi2_2:= icosphi2_2+icosphi2_2;
  modcosphi2_2:= sqrt(Sqr(rcosphi2_2)+Sqr(icosphi2_2));
  tmp1 := 0.5*abs(modcosphi2_2+rcosphi2_2);
  tmp2 := 0.5*abs(modcosphi2_2-rcosphi2_2);
  rcosphi2:= sqrt(tmp1);
  icosphi2:= sqrt(tmp2);
  sqrmodcosphi2 := tmp1 + tmp2;
  if icosphi2_2 < 0 then icosphi2 := -icosphi2;

```

```

    rt_2 := -icosphi2*in2+rcosphi2*rn2;
    it_2 := in2*rcosphi2+icosphi2*rn2;
    sqrmodt_2 := Sqr(rt_2)+Sqr(it_2);
end;

```

```

procedure CalculateY;

```

```

begin

```

```

    { calculate rp1 rs1}

```

```

    n_1_2 := Sqr(n_1);

```

```

    sqrcosphi1 := 1-n_0sinphi_2/n_1_2;

```

```

    cosphi1 := sqrt(sqrcosphi1);

```

```

    t_1 := n_1*cosphi1;

```

```

    rs_1 := (t_0-t_1)/(t_0+t_1);

```

```

    tmp1 := n_1*cosphi;

```

```

    tmp2 := n_0*cosphi1;

```

```

    rp_1 := (tmp1-tmp2)/(tmp1+tmp2);

```

```

    { real and imag parts of rp2, rs2 }

```

```

    tmp1 := 1/(Sqr(it_2)+Sqr(rt_2+t_1));

```

```

    rrs_2 := (-sqrmodt_2+Sqr(t_1))*tmp1;

```

```

    irs_2 := (-2*it_2*t_1)*tmp1;

```

```

    ru_12 := n_1*rcosphi2;

```

```

    iu_12 := n_1*icosphi2;

```

```

    ru_21 := cosphi1*rn2;

```

```

    iu_21 := cosphi1*in2;

```

```

    tmp1 := 1/(Sqr(iu_21+iu_12)+Sqr(ru_21+ru_12));

```

```

    rrp_2 := (Sqr(iu_21)-Sqr(iu_12)+Sqr(ru_21)-Sqr(ru_12))*tmp1;

```

```

    tmp1 := tmp1+tmp1;

```

```

    irp_2 := (-iu_12*ru_21+iu_21*ru_12)*tmp1;

```

```

    rsrpro := -rs_1+rp_1*rro;

```

```

    rrprs_2 := -irp_2*irs_2+rrp_2*rrs_2;

```

```

    irprs_2 := irs_2*rrp_2+irp_2*rrs_2;

```

```

    rprs_1 := rp_1*rs_1;

```

```

    rE := -iro*irprs_2*rp_1+rrprs_2*rsrpro;

```

```

iE := iro*rp_1*rrprs_2+irprs_2*rsrpro;
tmp1 := rprs_1*rro-1;
tmp2 := -rprs_1+rro;
rB := -iro*irs_2-iro*irp_2*rprs_1+tmp1*rrp_2+tmp2*rrs_2;
iB := tmp1*irp_2+tmp2*irs_2+iro*rprs_1*rrp_2+iro*rrs_2;
rC := -rp_1+rro*rs_1;
iC := iro*rs_1;
rF := -Sqr(iB)+4*(iC*iE-rC*rE)+Sqr(rB);
imF := 2*iB*rB-4*(iE*rC+iC*rE);
mF := sqrt(Sqr(imF)+Sqr(rF));
iD := sqrt(0.5*abs(mF-rF));
if imF < 0 then iD := -iD;
rD := sqrt(0.5*abs(mF+rF));
tmp1 := 0.5/(Sqr(iE)+Sqr(rE));
rY1 := ((-iB+iD)*iE+(-rB+rD)*rE)*tmp1;
iY1 := (-(-rB+rD)*iE+(-iB+iD)*rE)*tmp1;
lnr1 := 0.5*ln(sqr(rY1)+sqr(iY1));
rY2 := ((-iB-iD)*iE+(-rB-rD)*rE)*tmp1;
iY2 := (-(-rB-rD)*iE+(-iB-iD)*rE)*tmp1;
lnr2 := 0.5*ln(sqr(rY2)+sqr(iY2));
if abs(lnr1) < abs(lnr2) then
  begin
    lnr := lnr1;
    rY := rY1;
    iY := iY1;
  end
else
  begin
    lnr := lnr2;
    rY := rY2;
    iY := iY2;
  end;
end;
end;

```



```

procedure Inversion;
  { procède à l'inversion des données ellipsométriques }
begin
  SetData;                      { assigne les paramètres d'inversion }
  Initialize;                   { calcule les constantes de la boucle }
  CalculateY;
  n_10 := n_1;
  lnr0 := lnr;
  n_1 := n_1 + 0.1;

  { commence la recherche itérative }
  while abs(n_1-n_10) > 0.0001 do
    begin
      CalculateY;
      n_next := n_1 - lnr*(n_10-n_1)/(lnr0-lnr);
      n_10 := n_1;
      n_1 := n_next;
    end;
  { calcule l'épaisseur }
  D :=(pi2 -Arg(rY,iY))*d_cte / t_1;
end;

begin
  t0 := SystemTicks;           { retient le temps du début d'exécution }
  count := 1000;               { exécute la recherche de solution 1000 fois }

  for j := 1 to count do Inversion;

  { calcule le temps d'exécution }
  time := 1000*(SystemTicks-t0)/(count*ClockFreq);

  { affiche les résultats }
  WriteLn (n_1,d);
  WriteLn (time:7:2);
end.

```

## Program Yoriume;

type

float = double;

const

deg : float = Pi / 180;

ClockFreq = 18.2;

ov4pi : float = 1 / (4 \* pi);

pi2 : float = 2 \* pi;

var

{ temps de l'horloge !!! code dépendant de la machine !!!}

SystemTicks : longint absolute \$40:\$6C;

t0, count : longint;

time : real;

var

phi, del, psi, n\_0, n\_1, dn\_1, sinphi, cosphi, t\_0, n\_0sinphi,

t\_1, cosphi1, rn2\_2, in2\_2, mod\_n2\_2, tmp1, tmp2, tmp3, tmp4, rcosphi2\_2,

icosphi2\_2, modcosphi2\_2, rcosphi2, icosphi2, rp\_1, rs\_1, sqrmodrs\_2,

sindel, cosdel, tanpsi, rn2, in2, sqrmodcosphi2, sqrcosphi1, sqr\_t\_1, sqr\_it\_2,

sqrmodrp\_2, ksi\_1, ksix\_2, ksiy\_2, modksi\_2, sqrrho\_1, sqrrho\_2,

rho\_1, rho\_2, a\_1, a\_2, A, B\_2, C, diffksi, x, y, del\_1, del\_2, minn\_1,

maxn\_1, s0, s1, w1, d, d\_cte, n\_0sinphi\_2, n\_1\_2, sintan, costan, rrs\_2, irs\_2,

rrp\_2, irp\_2, rt\_2, it\_2, sqrmodt\_2, ru\_12, iu\_12, ru\_21, iu\_21, y\_2, im, re : float;

i, j, q : longint;

procedure SetData;

begin

phi := 70 \* deg;

del := 137.45 \* deg;

psi := 14.27 \* deg;

rn2 := 4.08;

in2 := -0.028;

```

    wl := 5461;
    n_0 := 1;
    n_1 := 1.7;
    dn_1 := 0.1;
    minn_1 := 1;
    maxn_1 := 3;
    q := 0;
    i := 0;
end;

```

```

procedure Initialize;
begin
    { calcule tous les paramètres dont la valeur est indépendante
      d'une itération à l'autre }
    sinphi:=sin(phi);
    cosphi:=cos(phi);
    t_0 := n_0*cosphi;
    n_0sinphi := n_0*sinphi;
    n_0sinphi_2 := Sqr(n_0sinphi);
    sindel := sin(del);
    cosdel := cos(del);
    tanpsi := sin(psi)/cos(psi);
    sintan := sindel*tanpsi;
    costan := cosdel*tanpsi;
    d_cte := -wl*ov4pi;

    { real and imag parts of cos(phi2) }
    rn2_2:=Sqr(rn2);
    in2_2:=Sqr(in2);
    mod_n2_2:=in2_2+rn2_2;
    tmp1:= Sqr(n_0sinphi/mod_n2_2);
    rcosphi2_2:= 1+tmp1*(in2_2-rn2_2);
    icosphi2_2:= tmp1*rn2*in2;
    icosphi2_2:= icosphi2_2+icosphi2_2;
    modcosphi2_2:= sqrt(Sqr(rcosphi2_2)+Sqr(icosphi2_2));

```

```

tmp1 := 0.5*abs(modcosphi2_2+rcosphi2_2);
tmp2 := 0.5*abs(modcosphi2_2-rcosphi2_2);
rcosphi2:= sqrt(tmp1);
icosphi2:= sqrt(tmp2);
sqrmodcosphi2 := tmp1 + tmp2;
if icosphi2_2 < 0 then icosphi2 := -icosphi2;

```

```

rt_2 := -icosphi2*in2+rcosphi2*rn2;
it_2 := in2*rcosphi2+icosphi2*rn2;
sqr_it_2 := Sqr(it_2);
sqrmodt_2 := Sqr(rt_2)+sqr_it_2;

```

```

end;

```

```

procedure NoResults;
begin
  WriteLn ('OUT OF RANGE');
  Halt;
end;

```

```

procedure Inversion;

```

```

label
  pointA, pointB, pointC, pointDE;

```

```

begin
  SetData;
  Initialize;

```

```

pointDE:

```

```

{ calcule rp1 et rs1 }
n_1_2 := Sqr(n_1);

```

```

sqr cosphi1 := 1-n_0sinphi_2/n_1_2;
cosphi1 := sqrt(sqr cosphi1);
t_1 := n_1*cosphi1;
sqr_t_1 := Sqr(t_1);
rs_1 := (t_0-t_1)/(t_0+t_1);
tmp1 := n_1*cosphi;
tmp2 := n_0*cosphi1;
rp_1 := (tmp1-tmp2)/(tmp1+tmp2);

{ calcule les parties réelles et imag. de rp_2, rs_2 }
tmp1 := 1/(sqr_it_2+Sqr(rt_2+t_1));
rrs_2 := (-sqrmodt_2+sqr_t_1)*tmp1;
irs_2 := -2*it_2*t_1*tmp1;
ru_12 := n_1*rcosphi2;
iu_12 := n_1*icosphi2;
ru_21 := cosphi1*rn2;
iu_21 := cosphi1*in2;
tmp1 := 1/(Sqr(iu_21+iu_12)+Sqr(ru_21+ru_12));
rrp_2 := (Sqr(iu_21)-Sqr(iu_12)+Sqr(ru_21)-Sqr(ru_12))*tmp1;
irp_2 := 2*(-iu_12*ru_21+iu_21*ru_12)*tmp1;

{ calcule le module au carré de rs2, rp2 }
sqrmodrs_2 := Sqr(rrs_2)+Sqr(irs_2);
sqrmodrp_2 := Sqr(rrp_2)+Sqr(irp_2);

{ calcule les ksi et rho }
tmp1 := 1/(-sqrmodrp_2*rp_1*rp_1+1);
tmp2 := tanpsi/(-sqrmodrs_2*rs_1*rs_1+1);
ksi_1 := (-sqrmodrp_2+1)*rp_1*tmp1;
modksi_2 := (-sqrmodrs_2+1)*rs_1*tmp2;
ksix_2 := modksi_2*cosdel;
ksiy_2 := modksi_2*sindel;
sqrrho_1 := sqrmodrp_2*Sqr((-rp_1*rp_1+1)*tmp1);
rho_1 := sqrt(sqrrho_1);
sqrrho_2 := sqrmodrs_2*Sqr((-rs_1*rs_1+1)*tmp2);
rho_2 := sqrt(sqrrho_2);

```

```

diffksi := sqrt(Sqr(ksiy_2) + Sqr(ksi_1 - ksix_2));

if diffksi > abs(rho_1 - rho_2) then
  if diffksi < rho_1 + rho_2 then
    begin
      { calcule les x et y }
      tmp1 := 1/ksiy_2;
      a_1 := -0.5*(sqr(rho_2 - sqr(rho_1) + Sqr(ksi_1) - Sqr(ksix_2) -
        Sqr(ksiy_2))*tmp1;
      a_2 := (ksi_1 - ksix_2)*tmp1;
      A := Sqr(a_2) + 1;
      B_2 := -ksi_1 + a_2*a_1;
      C := -sqr(rho_1) + Sqr(ksi_1) + Sqr(a_1);
      if rs_1 < 0 then x := (-B_2 - sqrt(Sqr(B_2) - A*C))/A
        else x := (-B_2 + sqrt(Sqr(B_2) - A*C))/A;
      y := a_2*x + a_1;

      { calcule les del_1 et del_2 }
      tmp1 := rp_1*x-1;
      tmp2 := -rp_1*y;
      tmp3 := rrp_2*tmp1+irp_2*tmp2;
      tmp4 := rrp_2*tmp2-irp_2*tmp1;
      tmp1 := rp_1-x;
      tmp2 := -y;
      re := tmp3*tmp1+y*tmp4;
      im := -tmp3*y+tmp1*tmp4;
      if re > 0.0 then
        del_1 := arctan(im/re)
      else if re < 0.0 then
        if im >= 0.0 then del_1 := arctan(im/re) + Pi
        else del_1 := arctan(im/re) - Pi
      else if im > 0.0 then
        del_1 := Pi*0.5
      else if im < 0.0 then
        del_1 := -Pi*0.5
      else

```

```

        del_1 := 0.0;

        tmp1 := rs_1*sintan - y;
        tmp2 := rs_1*costan - x;
        tmp3 := rrs_2*tmp2 + irs_2*tmp1;
        tmp4 := rrs_2*tmp1 - irs_2*tmp2;
        tmp1 := sintan - rs_1*y;
        tmp2 := -costan + rs_1*x;
        re := tmp3*tmp2-tmp4*tmp1;
        im := tmp4*tmp2+tmp3*tmp1;
        if re > 0.0 then
            del_2 := arctan(im/re)
        else if re < 0.0 then
            if im >= 0.0 then del_2 := arctan(im/re) + Pi
            else del_2 := arctan(im/re) - Pi
        else if im > 0.0 then
            del_2 := Pi*0.5
        else if im < 0.0 then
            del_2 := -Pi*0.5
        else
            del_2 := 0.0;

        if abs((del_1 - del_2)/del_1) <= 1e-3 then
            begin
                if del_1 > 0 then del_1 := del_1 - pi2;
                d := d_cte*del_1/sqrt(n_1_2 - n_0sinphi_2);
                Exit;
            end
        else
            goto pointC;
        end
    else
        goto pointB
else
    goto pointA;

```

pointA:

```
    if rho_1 > rho_2 then
        begin
            n_1 := n_1 - abs(dn_1);
            dn_1 := -abs(dn_1);
            if n_1 < minn_1 then
                if q > 0 then
                    NoResults
                else
                    begin
                        dn_1 := 0.5*dn_1;
                        n_1 := n_1 - dn_1;
                        q := q + 1;
                        goto pointDE;
                    end
                else goto pointDE;
            end
        end
    else goto pointB;
```

pointB:

```
    n_1 := n_1 + abs(dn_1);
    dn_1 := abs(dn_1);
    if n_1 > maxn_1 then
        if q < 0 then
            NoResults
        else
            begin
                dn_1 := 0.5*dn_1;
                n_1 := n_1 + dn_1;
                q := q - 1;
                goto pointDE;
            end
        else goto pointDE;
```



```
pointC:
  s1 := del_1 - del_2;
  if i > 1 then dn_1 := -dn_1*s1/(s1-s0);
  n_1 := n_1 + dn_1;
  s0 := s1;
  while n_1 <= 1.0 do
    begin
      n_1 := n_1 - 0.2*dn_1;
      dn_1 := 0.8*dn_1;
    end;
  i := i+1;
  goto pointDE;
end;

begin
  count := 1;
  t0 := SystemTicks;
  for j := 1 to count do Inversion;
  time := 1000*(SystemTicks-t0)/(count*ClockFreq);
  WriteLn (n_1,d);
  writeln (time:7:2);
end.
```

```

function [D1,D2,coef,X1,X2,a,b,c,Rp,Rs]=d1d2(PSI,DELTA,N,fi,W);
if nargin==4 W=1; end
fi=sqrt(-1);
PSI=PSI*pi/180; DELTA=DELTA*pi/180;
Ro=tan(PSI)*exp(i*DELTA);
i=fi*pi/180;
m=max(size(N));
cf=sqrt(1-(N(1)*sin(fi))^2*N.^(-2));
A=N(2:m).*cf(1:m-1); B=N(1:m-1).*cf(2:m);
Rp=(A-B)./(A+B);
A=N(1:m-1).*cf(1:m-1); B=N(2:m).*cf(2:m);
Rs=(A-B)./(A+B);
A1(1) = Rp(3)*Rs(3)*(Ro*Rp(1)-Rs(1));
A1(2) = (Ro*Rp(1)-Rs(1))*(Rs(3)*Rp(2)+Rs(2)*Rp(3));
A1(3) = Rp(2)*Rs(2)*(Ro*Rp(1)-Rs(1));
B1(1) = Rp(3)*Rs(3)*(Rp(1)*Rs(1)*(Ro*Rs(2)-Rp(2))+(Ro*Rp(2)-Rs(2)));
B1(2) = (Ro*Rs(3)-Rp(3))*(Rp(1)*Rs(1)*Rp(2)*Rs(2)+1)...
        +(Ro*Rp(3)-Rs(3))*(Rp(1)*Rs(1)+Rp(2)*Rs(2));
B1(3) = (Ro*Rs(2)-Rp(2))+Rp(1)*Rs(1)*(Ro*Rp(2)-Rs(2));
C1(1) = Rp(2)*Rs(2)*Rp(3)*Rs(3)*(Ro*Rs(1)-Rp(1));
C1(2) = (Ro*Rs(1)-Rp(1))*(Rs(2)*Rs(3)+Rp(2)*Rp(3));
C1(3) = Ro*Rs(1)-Rp(1);

A2(1) = Rp(3)*Rs(3)*(Ro*Rp(1)-Rs(1));
A2(2) = Rp(3)*Rs(3)*(Rp(1)*Rs(1)*(Ro*Rs(2)-Rp(2))+(Ro*Rp(2)-Rs(2)));
A2(3) = Rp(3)*Rs(3)*(Ro*Rs(1)-Rp(1))*Rp(2)*Rs(2);
B2(1) = (Rs(3)*Rp(2)+Rp(3)*Rs(2))*(Ro*Rp(1)-Rs(1));
B2(2) = (Ro*Rs(3)-Rp(3))*(1+Rp(1)*Rs(1)*Rp(2)*Rs(2))...
        +(Ro*Rp(3)-Rs(3))*(Rp(2)*Rs(2)+Rp(1)*Rs(1));
B2(3) = (Ro*Rs(1)-Rp(1))*(Rp(2)*Rp(3)+Rs(2)*Rs(3));
C2(1) = Rp(2)*Rs(2)*(Ro*Rp(1)-Rs(1));
C2(2) = Rs(2)*(Ro-Rp(1)*Rs(1))+Rp(2)*(Ro*Rp(1)*Rs(1)-1);
C2(3) = Ro*Rs(1)-Rp(1);

Up = plsm(plmlt(flipud(A2(:))',B2),(-1)*plmlt(flipud(B2(:))',C2));

```

```
Down = plsm(plmlt(flipud(C2(:))',C2),(-1)*plmlt(flipud(A2(:))',A2));
```

```
uu=plmlt(Up,Up);
```

```
dd=plmlt(Down,Down);
```

```
a=plmlt(A1(1)*uu+A1(2)*plmlt(Up,Down)+A1(3)*dd,[1 0 0]);
```

```
b=plmlt(B1(1)*uu+B1(2)*plmlt(Up,Down)+B1(3)*dd,[1 0]);
```

```
c=C1(1)*uu+C1(2)*plmlt(Up,Down)+C1(3)*dd;
```

```
z = plsm(a,b);
```

```
coef = plsm(z,c);
```

```
X = roots(coef);
```

```
for j=1:max(size(X))
```

```
    if abs(abs(X(j))-1)<1e-5
```

```
        arg=-imag(log(X(j)));
```

```
        if arg < 0, arg=arg+2*pi; end;
```

```
        D1=[D1,arg*W/(4*pi*N(2)*cf(2))];
```

```
        X1=[X1,X(j)];
```

```
        XX2=polyval(Up,X(j))/polyval(Down,X(j));
```

```
        X2=[X2,XX2];
```

```
        arg=-imag(log(XX2));
```

```
        if arg < 0, arg=arg+2*pi; end;
```

```
        D2=[D2,arg*W/(4*pi*N(3)*cf(3))];
```

```
    end;
```

```
end;
```

```
end
```

## BIBLIOGRAPHIE

1. Pour un exposé complet, voir R. M. A. Azzam et N. M. Bashara, *Ellipsometry and polarized light* (North-Holland, Amsterdam, 1977).
2. R. M. A. Azzam et N. M. Bashara, *ibid.* p. 165.
3. Z. Knittl, *Optics of thin films* (Wiley, New York, 1976).
4. R. M. A. Azzam et N. M. Bashara, *ibid.* §4.6.
5. R. M. A. Azzam et N. M. Bashara, *ibid.* p. 274.
6. R. M. A. Azzam et N. M. Bashara, *ibid.* p. 316.
7. S. C. Russev et D. D. Georgieva, "Analytical solution of another ellipsometric inverse problem", *J. Mod. Opt.* **38**, 1217-1222 (1991).
8. S. C. Russev et M. I. Boyanov, "Analytic determination of the optical constants of the substrate in an arbitrary multilayer system using ellipsometric data", communication personnelle.
9. J. Lekner, "Analytic inversion of ellipsometric data for an unsupported non-absorbing uniform layer", *J. Opt. Soc. Am. A* **7**, 1875-1877 (1990).
10. R. M. A. Azzam, "Simple and direct determination of complex refractive index and thickness of unsupported or embedded thin films by combined reflection and transmission ellipsometry at 45° angle of incidence", *J. Opt. Soc. Am.* **73**, 1080-1082 (1983).

11. R. M. A. Azzam, "Ellipsometry of unsupported and embedded films", J. Phys. (Paris), C10, 67-70 (1983).
12. R. M. A. Azzam, "Transmission ellipsometry on transparent unbacked or embedded thin films with application to soap films in air", Appl. Opt. 30, 2801-2806 (1991).
13. J. Lekner, "Determination of complex refractive index and thickness of a homogeneous layer by combined reflection and transmission ellipsometry", J. Opt. Soc. Am. A 11, 2156-2158 (1994).
14. J. Lekner, "Inversion of transmission ellipsometric data for transparent films", Appl. Opt. 33, 5108-5110 (1994).
15. E. E. Dagman, "Analytical solution of the inverse ellipsometry problem in the modeling of a single-layer reflecting system", Opt. Spectrosc. (USSR) 62, 500-503 (1987).
16. V. Krisdhasima, J. McGuire et R. Sproull, "A one-film-model ellipsometry program for the simultaneous calculation of protein film thickness and refractive index", Surf. Interface Ana. 18, 453-456 (1992).
17. F. K. Urban III, "Ellipsometry algorithm for absorbing films", Appl. Opt. 32, 2339-2344 (1993).
18. Y. Yoriome, "Method for numerical inversion of the ellipsometry equation for transparent films", J. Opt. Soc. Am. 73, 888-891 (1983).
19. O. Hunderi, "New method for accurate determination of optical constants", Appl. Opt. 11, 1572-1578 (1972).

20. A. R. Reinberg, "Ellipsometer data analysis with a small programmable desk calculator", *Appl. Opt.* 11, 1273-1274 (1972).
21. T. Yamaguchi et H. Takahashi, "Ellipsometric method for separate measurement of  $n$  and  $d$  of a transparent film", *Appl. Opt.* 14, 2010-2015 (1975).
22. F. L. McCrackin, E. Passaglia, R. R. Stromberg et H. L. Steinberg, "Measurement of the thickness and refractive index of very thin films and the optical properties of surfaces by ellipsometry", *J. Res. Nat. Bur. Std. Sect. A* 67, 363-377 (1963).
23. D. Charlot et A. Maruani, "Ellipsometric data processing: an efficient method and an analysis of the relative errors", *Appl. Opt.* 24, 3368-3373 (1985).
24. R. M. A. Azzam et N. M. Bashara, *ibid.* p. 288.
25. J. Lekner, "Inversion of ellipsometric reflection data", *Appl. Opt.* 33, 5159-5165 (1994).
26. J.-P. Drolet, S. C. Russev, M. I. Boyanov et R. M. Leblanc, "Polynomial inversion of the single transparent layer problem in ellipsometry", *J. Opt. Soc. Am.* 11, 3284-3291 (1994).
27. S. C. Russev, I. Mircheva, J.-P. Drolet, D. Ducharme et R. M. Leblanc, "Polynomial solution for two thicknesses of a multilayer system from single ellipsometric measurement", *J. Opt. Soc. Am. A*, sous presse (1996).
28. S. Bosch, "Double layer ellipsometry: an efficient numerical method for data analysis", *Surf. Sci.* 289, 411-417 (1993).

29. A. F. Antippa, R. M. Leblanc et D. Ducharme, "Multiple wavelength ellipsometry in thin uniaxial nonabsorbing films", J. Opt. Soc. Am. A **3**, 1794-1802 (1986).
30. J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2<sup>nd</sup> edition (Wiley, New York, 1975) p. 284.